



# Maillage de l'enveloppe d'une réunion de sphères

Patrick Laug, Houman Borouchaki

## ► To cite this version:

Patrick Laug, Houman Borouchaki. Maillage de l'enveloppe d'une réunion de sphères. [Rapport de recherche] RR-3229, INRIA. 1997. inria-00073460

**HAL Id: inria-00073460**

**<https://inria.hal.science/inria-00073460>**

Submitted on 24 May 2006

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# *Maillage de l'enveloppe d'une réunion de sphères*

Patrick LAUG et Houman BOROUCHAKI

**N° 3229**

13 août 1997

\_\_\_\_\_ THÈME 4 \_\_\_\_\_

 *apport  
de recherche*  




## Maillage de l'enveloppe d'une réunion de sphères

Patrick LAUG\* et Houman BOROUCI<sup>†</sup>

Thème 4 — Simulation et optimisation  
de systèmes complexes  
Projet Gamma

Rapport de recherche n° 3229 — 13 août 1997 — 50 pages

**Résumé :** Dans un précédent rapport, nous avons considéré le maillage des surfaces paramétrées. Une surface est alors définie comme l'union de plusieurs morceaux. À présent, nous nous intéressons au cas particulier où chaque morceau est une portion de sphère. Cette étude trouve une application dans le domaine de la chimie, où une molécule peut être modélisée par un ensemble d'atomes sphériques.

**Mots-clé :** maillage surfacique, surface paramétrée, sphère, molécule.

*(Abstract: pto)*

\* E-mail: Patrick.Laug@inria.fr

<sup>†</sup> E-mail: Houman.Borouchaki@univ-troyes.fr



## Meshing the Envelope of a Union of Spheres

**Abstract:** In a previous report, we considered how to mesh parametric surfaces. A surface is then defined as the union of several pieces. Now, our interest focuses on the case where each piece is a sphere portion. This study has an application in the chemistry domain, where a molecule can be represented as a set of spherical atoms.

**Key-words:** surface mesh, parametric surface, sphere, molecule.

## Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Calcul des intersections des sphères</b>	<b>7</b>
<b>3</b>	<b>Calcul des intersections des cercles</b>	<b>7</b>
3.1	Calcul des points d'intersection de deux cercles sur une même sphère	8
3.2	Fusionnement des points très proches sur un même cercle . . . . .	9
<b>4</b>	<b>Détermination des arcs extérieurs</b>	<b>10</b>
<b>5</b>	<b>Paramétrisation d'une surface sphérique</b>	<b>10</b>
5.1	Projection orthogonale . . . . .	11
5.2	Projection stéréographique . . . . .	13
5.3	Choix de l'équateur . . . . .	14
<b>6</b>	<b>Définition des contours bidimensionnels</b>	<b>15</b>
<b>7</b>	<b>Discrétisation des contours bidimensionnels</b>	<b>16</b>
7.1	Vérification des arêtes croisées . . . . .	16
7.2	Vérification des arêtes proches . . . . .	17
7.3	Vérification des longueurs des arêtes . . . . .	18
<b>8</b>	<b>Maillage des domaines bidimensionnels</b>	<b>18</b>
<b>9</b>	<b>Algorithme complet de la méthode et parallélisation</b>	<b>21</b>
9.1	Algorithme A . . . . .	21
9.2	Algorithme B . . . . .	22
9.3	Parallélisation . . . . .	22
<b>10</b>	<b>Application à la chimie</b>	<b>23</b>
10.1	Pyrène - Maillage grossier . . . . .	27
10.2	Pyrène - Maillage fin . . . . .	29
10.3	Glacé - Maillage grossier . . . . .	31
10.4	Glacé - Maillage fin . . . . .	33
10.5	Carotène - Maillage grossier . . . . .	35
10.6	Carotène - Maillage fin . . . . .	37
10.7	Diamant - Maillage grossier . . . . .	39

10.8 Diamant - Maillage fin . . . . .	41
10.9 ADN - Maillage grossier . . . . .	43
10.10ADN - Maillage fin . . . . .	46
<b>11 Conclusion</b>	<b>49</b>

## 1 Introduction

Dans un précédent rapport, nous avons considéré le maillage des surfaces paramétrées [3]. Une surface est alors définie comme l'union de plusieurs morceaux. Deux morceaux distincts peuvent avoir une frontière commune, appelée courbe interface, ou bien être totalement disjoints. Chaque morceau est l'image d'un espace bidimensionnel (appelé domaine des paramètres) qui lui est associé. Schématiquement, le processus de maillage comporte alors les étapes suivantes :

1. Donner une paramétrisation pour chaque morceau  $i$ , c'est-à-dire :
  - un domaine de paramètres  $\Omega_i \subset \mathbb{R}^2$ ,
  - une application  $\varphi_i$  de  $\mathbb{R}^2$  dans  $\mathbb{R}^3$  telle que le morceau  $i$  est l'image par  $\varphi_i$  de  $\Omega_i$ .

Notons que tout domaine de paramètres  $\Omega_i$  est défini à partir de sa frontière, et que les courbes interfaces sont les images de ces frontières.

2. Discrétiser chaque courbe interface dans  $\mathbb{R}^3$ .
3. Reporter les discrétisations précédentes de  $\mathbb{R}^3$  dans  $\mathbb{R}^2$ .
4. Mailler chaque domaine de paramètres  $\Omega_i$  dans  $\mathbb{R}^2$  à partir de sa frontière, en utilisant certaines propriétés intrinsèques de la surface image associée.
5. Obtenir le maillage surfacique cherché comme l'union des images des maillages plans précédents.

Afin de préciser et de valider cette étude, nous avons considéré plusieurs types de surfaces paramétrées, notamment les surfaces cylindriques, sphériques, de Bézier et B-splines. Des études plus spécifiques ont été menées dans le cas des surfaces sphériques, ce qui constitue l'objet du présent rapport.

**La donnée du problème est un ensemble de sphères  $\{S_i\}$  a priori quelconques (plusieurs sphères peuvent se couper entre elles). Chaque sphère  $S_i$  est définie par son centre  $(x_i, y_i, z_i)$  et son rayon  $r_i$ . Nous cherchons à mailler l'enveloppe  $E$  de la réunion de ces sphères en appliquant le procédé décrit ci-dessus.** Rappelons que, par définition, l'enveloppe  $E$  de la réunion des sphères  $\{S_i\}$  est la frontière topologique de l'union des boules  $\{B_i\}$ , où  $B_i$  est la boule de frontière  $S_i$ .

Comme indiqué dans le schéma du processus de maillage, la tâche fondamentale consiste à réaliser l'étape 1 (définition des domaines  $\{\Omega_i\}$  et des applications  $\{\varphi_i\}$ ). Ceci revient, dans un premier temps, à déterminer les courbes interfaces de  $E$ , ce que nous réalisons en plusieurs phases.

Elles sont dans l'ordre :

- Calculer les intersections des sphères  $\{S_i\}$  deux à deux, donnant ainsi un ensemble de cercles  $\{C_j\}$ . *Voir section 2.*
- Calculer les intersections des cercles  $\{C_j\}$  deux à deux, donnant ainsi un ensemble de points  $\{P_k\}$ . *Voir section 3.*
- Les différents points d'un cercle  $C_j$  définissent une partition du cercle en un ensemble d'arcs. Extraire l'ensemble des arcs qui sont à l'extérieur des sphères, formant ainsi l'interface cherchée. *Voir section 4.*

Dans un deuxième temps, nous devons définir des applications  $\{\varphi_i\}$  dont les images forment l'enveloppe  $E$ . Une solution naturelle est de diviser chaque sphère par un plan passant par un grand cercle (équateur). Le domaine des paramètres  $\Omega_i$  est alors le disque intérieur à ce grand cercle, et  $\varphi_i$  est la fonction inverse d'une projection. Cependant, un soin particulier doit être apporté quant au type de projection (orthogonal ou stéréographique) et quant au plan de l'équateur. *Voir section 5.*

Dans un troisième temps, les courbes interfaces de  $E$  sont approchées par des splines. Par projection, nous obtenons les contours des domaines de paramètres  $\{\Omega_i\}$  dans un espace bidimensionnel. *Voir section 6.*

Ayant réalisé l'étape 1 de notre processus de maillage, il suffit de réaliser les étapes suivantes de manière assez classique. Les courbes interfaces sont discrétisées tout en veillant à la qualité des maillages des domaines qui en résultent. *Voir section 7.* Ces discrétisations sont reportées dans les domaines de paramètres et ceux-ci sont maillés à partir de la discrétisation de leurs frontières. Nous obtenons finalement des maillages plans dont l'image forme le maillage surfacique cherché. *Voir section 8.*

Le déroulement complet de notre méthode est résumé par deux algorithmes écrits en pseudo-code, mettant ainsi en évidence de nombreuses parties parallélisables. *Voir section 9.* Quelques exemples d'application issus du domaine de la chimie, où une molécule peut être modélisée par un ensemble d'atomes sphériques, sont maillés avec la méthode introduite. *Voir section 10.* Enfin, une conclusion est proposée. *Voir section 11.*

## 2 Calcul des intersections des sphères

Nous cherchons à déterminer, s'il existe, le cercle intersection de deux sphères  $(S_1, S_2)$  de centres  $(C_1, C_2)$  et de rayons  $(r_1, r_2)$ .

Posons  $\vec{v} = \overrightarrow{C_1 C_2}$ . Si  $\|\vec{v}\| = 0$ , les deux sphères sont concentriques. Sinon, considérons le plan vertical passant par  $C_1$  et  $C_2$  (voir figure 1). Dans ce plan, définissons le repère orthonormé  $(\vec{i}, \vec{j})$  tel que  $\vec{i} = \frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|}$ , et cherchons les points d'intersection des cercles d'équations  $x^2 + y^2 = r_1^2$  et  $(x - \|\vec{v}\|)^2 + y^2 = r_2^2$ . Soient  $\lambda = \frac{r_1^2 - r_2^2 + \|\vec{v}\|^2}{2\|\vec{v}\|}$  et  $\mu = r_1^2 - \lambda^2$ . Si  $\mu > 0$ , les points cherchés sont  $A = (\lambda, \sqrt{\mu})$  et  $B = (\lambda, -\sqrt{\mu})$ . Si  $\mu = 0$ , il y a un seul point de contact. Si  $\mu < 0$ , il n'y a pas d'intersection.

En pratique, si  $\mu < \varepsilon$  où  $\varepsilon$  est une valeur très faible fixée a priori, nous considérons qu'il n'y a pas d'intersection, afin de tenir compte des erreurs d'arrondi et d'éviter un maillage localement trop fin.

Dans l'espace  $\mathbb{R}^3$ , l'intersection des sphères  $S_1$  et  $S_2$  est un cercle de centre  $C$  (milieu du segment  $AB$ ) et de rayon  $\sqrt{\mu}$ . Ce cercle est dans le plan qui passe par  $C$  et dont le vecteur directeur est  $\vec{v}$ , ce qui permet d'exhiber son équation sous la forme  $ax + by + cz + d = 0$ . En anticipant sur la suite de ce rapport (voir section 4), notons que la surface de la molécule ne contient que la partie de la sphère  $S_1$  (resp.  $S_2$ ) vérifiant l'inéquation  $ax + by + cz + d \leq 0$  (resp.  $\geq 0$ ).

Si le nombre de sphères  $\{S_i\}$  données initialement est important, le calcul des intersections des sphères deux à deux devient coûteux. Une optimisation efficace est obtenue en subdivisant l'espace par une grille régulière ou adaptée à la répartition des sphères (par exemple un *octree*). En effet, il suffit d'associer à chaque case de la grille toutes les sphères qui la contiennent ou qui la coupent. Cette subdivision permet, pour une sphère donnée, de limiter très fortement les recherches des sphères qui la coupent.

## 3 Calcul des intersections des cercles

Dans la section précédente, nous avons calculé les intersections des sphères  $\{S_i\}$  deux à deux, donnant ainsi un ensemble de cercles  $\{C_j\}$ . Nous cherchons maintenant à déterminer les intersections de ces cercles entre eux. Nous montrons ensuite qu'il est nécessaire de fusionner les points très proches sur un cercle donné car, comme nous le montrons par la suite, la qualité du maillage final en dépend.

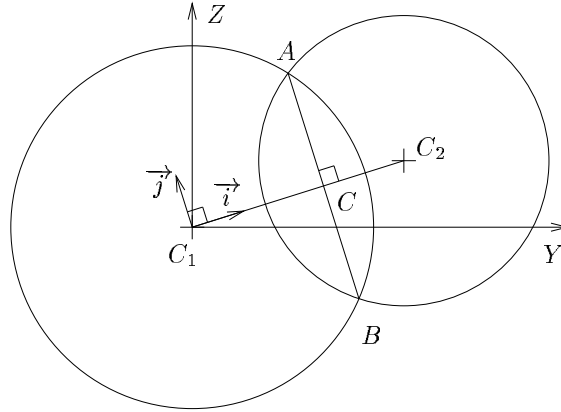


FIG. 1 - Intersection de deux sphères (coupe verticale).

### 3.1 Calcul des points d'intersection de deux cercles sur une même sphère

Soient deux cercles tracés sur une même sphère de centre  $O$  et de rayon  $r$  (voir figure 2). Chaque cercle est dans un plan dont le vecteur directeur est connu, respectivement  $\vec{v}_1$  et  $\vec{v}_2$ . Cherchons à déterminer, s'ils existent, les points d'intersection de ces deux cercles,

Le principe de la méthode est de considérer un plan tel que la projection de chacun des deux cercles sur ce plan se réduit à un segment droit. Posons  $\vec{V} = \vec{v}_1 \wedge \vec{v}_2$ . Si  $\|\vec{V}\| = 0$ , les plans des cercles sont parallèles, donc les cercles ne se coupent pas.

Sinon,  $\vec{V}$  est un vecteur perpendiculaire à la fois à  $\vec{v}_1$  et à  $\vec{v}_2$ . En posant  $\vec{K} = \frac{\vec{V}}{\|\vec{V}\|}$ ,

$\vec{T} = \frac{\vec{v}_1}{\|\vec{v}_1\|}$  et  $\vec{J} = \vec{K} \wedge \vec{T}$ , on obtient un repère orthonormé  $(\vec{T}, \vec{J}, \vec{K})$ . Dans ce nouveau repère, les équations des plans des cercles sont sous la forme réduite  $A_1 X + D_1 = 0$  et  $A_2 X + B_2 Y + D_2 = 0$ . Si ce système linéaire admet une solution  $(X, Y)$ , on en déduit  $\lambda = r^2 - X^2 - Y^2$ . Si  $\lambda > 0$ , nous pouvons calculer  $Z = \pm\sqrt{\lambda}$  et, en revenant au repère d'origine, obtenir les coordonnées des points cherchés. Si  $\lambda = 0$ , il y a un seul point de contact. Si  $\lambda < 0$ , il n'y a pas d'intersection.

En pratique, si les cercles se touchent “presque” ou si les points d'intersection sont très “proches”, nous considérons qu'il y a un seul point de contact, toujours dans le but d'éviter un maillage localement trop fin.

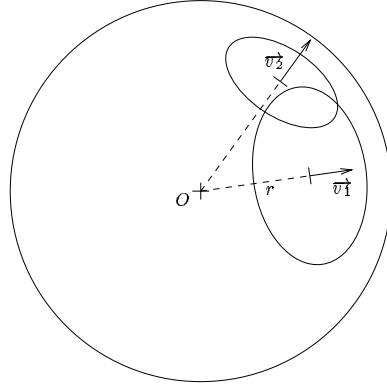


FIG. 2 - Intersection de deux cercles sur une même sphère.

Dans le calcul des intersections de tous les cercles entre eux, il faut veiller à ne pas calculer plusieurs fois les mêmes points. En effet, si trois sphères  $S_1, S_2, S_3$  se coupent entre elles, leurs cercles intersections sont  $C_1 = S_1 \cap S_2$ ,  $C_2 = S_2 \cap S_3$  et  $C_3 = S_3 \cap S_1$ . Ces trois cercles se coupent entre eux en deux points seulement puisque  $C_1 \cap C_2 = C_2 \cap C_3 = C_3 \cap C_1 = S_1 \cap S_2 \cap S_3$  (par associativité).

### 3.2 Fusionnement des points très proches sur un même cercle

À partir des sphères initiales  $\{S_i\}$ , nous savons maintenant calculer les cercles  $\{C_j\}$  à l'intersection de deux sphères, et les points  $\{P_k\}$  à l'intersection de deux cercles (ou plutôt, comme indiqué à la fin de la section précédente, de trois cercles). Considérons à présent un cercle fixé  $C_j$  et l'ensemble des points d'intersection  $\{P_k\}$  lui appartenant. Dans les deux sections précédentes, nous avons éliminé certains points trop proches, mais d'autres cas ne sont pas détectés. Par exemple, les figures 3 et 4 montrent l'enveloppe de quatre sphères de rayon 1 et de centres  $(0, 0)$ ,  $(1, 0)$ ,  $(1, 1)$  et  $(0, 0.999)$ . Pour y remédier, nous utilisons l'algorithme ci-dessous.

Pour chaque cercle  $C_j$  :

- Dans le plan du cercle  $C_j$ , définir un repère  $XOY$  tel que l'origine  $O$  est le centre du cercle.
- Associer à chaque point  $P_k$  l'angle  $\alpha_k = \widehat{XOP_k}$ .
- Trier les points par angles croissants.
- Si la différence entre deux angles consécutifs est inférieure à un certain seuil (par exemple  $5.e-3$  radians  $\approx 0.3^\circ$ ), alors fusionner les deux points correspondants en un seul point.



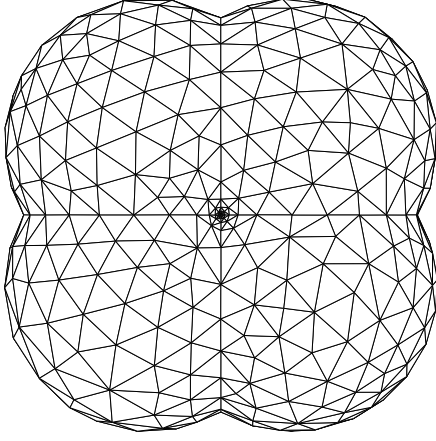


FIG. 3 - *Maillage sans détection des points très proches.*

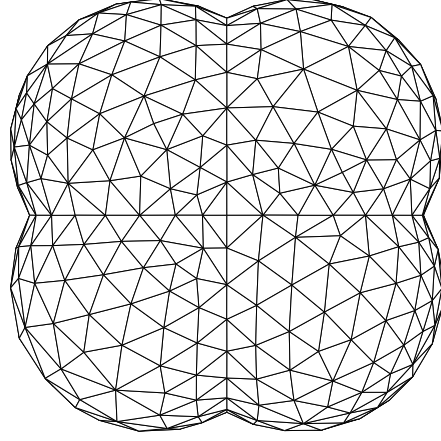


FIG. 4 - *Maillage avec détection des points très proches.*

## 4 Détermination des arcs extérieurs

Considérons à nouveau un cercle fixé  $C_j$  et l'ensemble des points d'intersection  $\{P_k\}$  lui appartenant. Cet ensemble définit une partition du cercle  $C_j$  en plusieurs arcs. L'ensemble des arcs qui ne sont pas à l'intérieur d'une sphère forme l'interface de toutes les surfaces sphériques (voir figure 5).

Il est possible de déterminer si un arc est intérieur ou extérieur en utilisant les équations des plans des cercles (voir section 2). En effet, si  $i$  est le milieu d'un arc et si  $ax + by + cz + d = 0$  est l'équation du plan d'un cercle, alors le signe de l'expression  $ax_M + by_M + cz_M + d$  donne le résultat voulu.

## 5 Paramétrisation d'une surface sphérique

Nous devons à présent paramétrer chacune des surfaces sphériques, ce qui revient à définir une projection dans le domaine des paramètres. Bien que la méthode la plus courante soit basée sur une projection orthogonale, il est nettement préférable ici d'utiliser une projection stéréographique. Par ailleurs, nous montrons que le choix du plan de l'équateur joue lui aussi un rôle important.

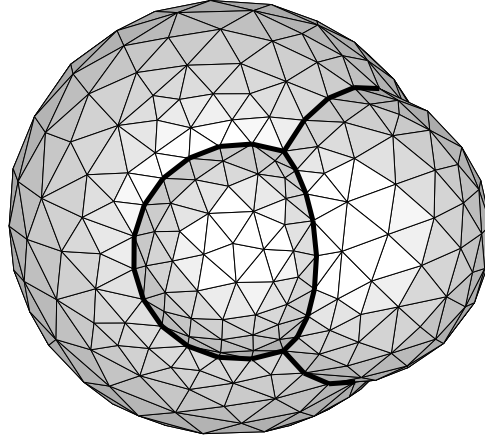


FIG. 5 - Arcs extérieurs à l'intersection de trois sphères.

Pour simplifier la présentation de ces méthodes de projection, nous considérons dans les deux cas une sphère centrée à l'origine  $O$  et de rayon  $r$ . Le plan de l'équateur est le plan horizontal  $z = 0$ . La sphère est divisée en deux parties appelées hémisphère Nord ( $z \geq 0$ ) et hémisphère Sud ( $z \leq 0$ ). Nous présentons uniquement la paramétrisation de l'hémisphère Nord  $H$ . En effet, le cas de l'hémisphère Sud s'en déduit par symétrie. Si l'on veut conserver un repère direct (surfaces orientées), on peut appliquer la transformation  $(x, y, z) \mapsto (x, -y, -z)$ . Enfin, le cas d'une sphère quelconque s'en déduit par un simple déplacement de repère (translation et rotation).

### 5.1 Projection orthogonale

Par projection orthogonale, chaque point  $P$  de l'hémisphère Nord  $H$  devient un point  $P'$  dans le plan de l'équateur (voir figure 7). Inversement, le domaine des paramètres  $\Omega$  est un disque de centre  $O$  et de rayon  $r$ , et l'application  $\varphi$  telle que  $\varphi(\Omega) = H$  est définie par :

$$\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \longmapsto \varphi(u, v) = \begin{bmatrix} x = u \\ y = v \\ z = \sqrt{r^2 - u^2 - v^2} \end{bmatrix}.$$

Cette paramétrisation a pour inconvénient d'être très instable près de l'équateur puisque, dans cette zone, une faible variation d'un point  $P'$  entraîne une forte variation du point  $P$  sur la sphère. Pour illustrer ce phénomène, nous montrons le maillage régulier d'un disque plan et son image dans l'espace (voir figures 6 et 8).

En outre, les dérivées partielles  $\frac{\partial z(u,v)}{\partial u}$  et  $\frac{\partial z(u,v)}{\partial v}$  tendent vers l'infini lorsque  $r^2 - u^2 - v^2$  tend vers 0 (cercle de l'équateur).

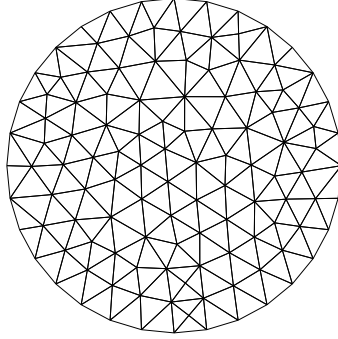


FIG. 6 - *Maillage régulier d'un disque plan.*

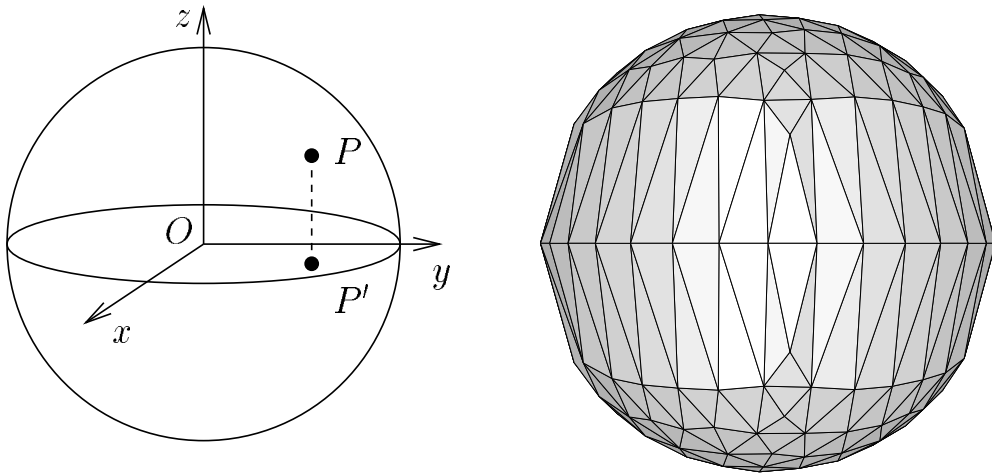


FIG. 7 - *Projection orthogonale - Schéma.* FIG. 8 - *Projection orthogonale - Maillage d'une sphère.*

## 5.2 Projection stéréographique

Pour éviter les inconvénients précédents, il est préférable d'utiliser une projection stéréographique. Si  $P = (x, y, z)$  est un point de l'hémisphère Nord et si  $S = (0, 0, -r)$  est le pôle Sud de la sphère entière, alors le point projeté  $P' = (u, v)$  est défini comme l'intersection de la droite  $(PS)$  avec le plan  $z = 0$  (voir figure 9). Il est facile de montrer que  $u = \frac{r x}{r + z}$  et  $v = \frac{r y}{r + z}$ . Inversement, nous avons :

$$\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \mapsto \varphi(u, v) = \begin{bmatrix} x = \frac{2 u r^2}{u^2 + v^2 + r^2} & / & (u^2 + v^2 + r^2) \\ y = \frac{2 v r^2}{u^2 + v^2 + r^2} & / & (u^2 + v^2 + r^2) \\ z = \frac{r (r^2 - u^2 - v^2)}{u^2 + v^2 + r^2} & / & (u^2 + v^2 + r^2) \end{bmatrix}.$$

Avec cette méthode, la fonction  $\varphi$  est stable près de l'équateur, comme le montre l'image du maillage régulier d'un disque (voir figures 6 et 10). De plus, elle est partout continûment dérivable sur le disque  $\Omega$  (en effet, la fonction  $\varphi$  est  $C^\infty$ ). Enfin, elle présente l'avantage de conserver les angles (mais pas les distances) [2]. Ainsi, un triangle équilatéral dans le domaine des paramètres  $\Omega$  reste équilatéral sur la sphère, ce qui donne directement un maillage surfacique tridimensionnel de bonne qualité (voir section 10).

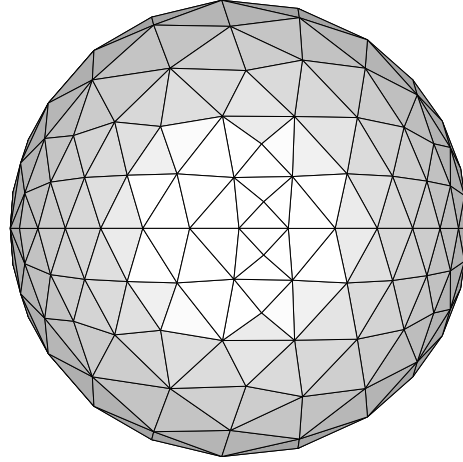
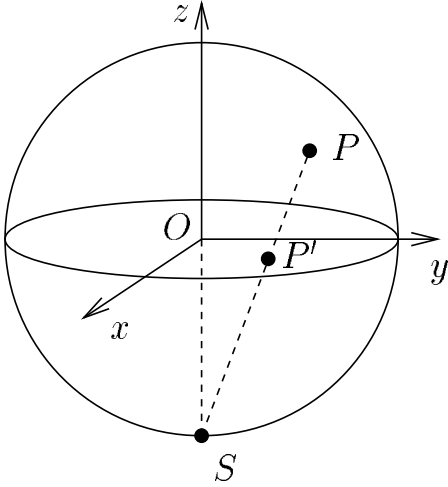


FIG. 9 - *Projection stéréographique - Schéma.* - FIG. 10 - *Projection stéréographique - Maillage d'une sphère.*

### 5.3 Choix de l'équateur

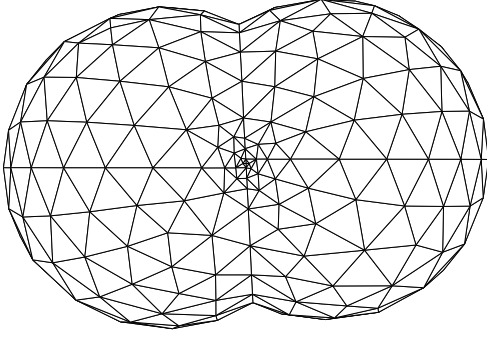
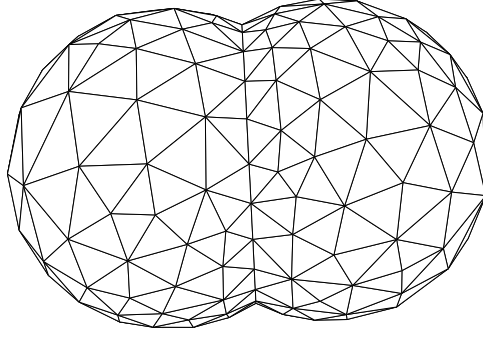
Dans les deux méthodes de paramétrisation précédentes, le plan de l'équateur est supposé horizontal. Ceci n'est pas acceptable lorsqu'il s'agit de mailler l'enveloppe d'une réunion de sphères. En effet, les points d'intersection de l'équateur avec les autres cercles risquent d'être trop proches (ce problème est similaire à celui déjà évoqué dans la section 3.2). Par exemple, les figures 11 et 12 montrent l'enveloppe de deux sphères de rayon 1 et de centres  $(0, 0)$  et  $(1, 0.05)$ . Pour y remédier, nous proposons l'algorithme ci-dessous.

Pour chaque sphère :

- Tirer aléatoirement le plan de l'équateur.
- Tester si ce tirage remplit certaines conditions.
- S'il ne les remplit pas toutes, recommencer un nouveau tirage.

Les conditions à remplir sont précisées ci-dessous. Rappelons que la sphère considérée peut couper les autres sphères selon plusieurs cercles, que nous appelons ici "cercles-intersections".

- **Inclinaison.** Si l'angle entre le plan de l'équateur et le plan d'un cercle-intersection est inférieur à un certain seuil (en pratique 25 degrés), le tirage est rejeté.
- **Distance entre les deux points d'intersection.** Si l'équateur coupe un cercle-intersection en deux points, et que la distance entre ces deux points est inférieure à un certain seuil (qui diminue au cours de l'exécution de la boucle), le tirage est rejeté.
- **Distance entre un point d'intersection et d'autres points.** Supposons que l'équateur coupe en un point  $P$  un arc extérieur de la sphère, d'extrémités  $A$  et  $B$ . Si la distance  $PA$  ou  $PB$  est inférieure à un certain seuil (qui diminue lui aussi), le tirage est rejeté.
- **Nombre de tirages.** Pour éviter une boucle infinie, le nombre maximal de tirages est fixé à une certaine valeur (en pratique, cette valeur est fixée à 50 mais n'est atteinte que très rarement).

FIG. 11 - *Équateurs horizontaux.*FIG. 12 - *Équateurs aléatoires.*

## 6 Définition des contours bidimensionnels

Nous allons maintenant définir les courbes interfaces, et donc les contours des domaines bidimensionnels, par des splines.

Les courbes interfaces sont des arcs de cercles (voir section 4). En pratique, on considère qu'un cercle entier est défini correctement par un polygone de contrôle ayant 32 arêtes égales. Un arc nécessite donc  $n$  arêtes, avec

$$n = \max(n_1, n_2), \quad n_1 = \text{nint} \left( \frac{32 \alpha}{2 \pi} \right), \quad n_2 \geq 1,$$

où  $\alpha$  représente l'angle au centre et “nint” l'entier le plus proche. Par précaution, on impose  $n_2 = 4$  arêtes au minimum par arc.

Ceci définit une discrétisation uniforme de l'arc. Par projection stéréographique des  $n + 1$  sommets  $(x, y, z)$ , on obtient les points de contrôle  $(u, v)$  du contour bidimensionnel, en rappelant les formules

$$u = \frac{r x}{r + z} \quad \text{et} \quad v = \frac{r y}{r + z} \quad (\text{voir section 5.2}).$$

Par convention, les arêtes du polygone de contrôle bidimensionnel sont orientées de manière à ce que le domaine à mailler soit toujours à leur gauche.

## 7 Discrétisation des contours bidimensionnels

Les courbes interfaces sont maintenant définies par des splines, que nous pouvons discrétiser en fonction de leurs courbures [3]. Par projection stéréographique, nous obtenons une discrétisation des contours bidimensionnels. Cependant, cette discrétisation risquerait de donner une mauvaise définition du domaine bidimensionnel, ou encore de générer des éléments frontaliers de qualité médiocre. Nous présentons ci-dessous les vérifications nécessaires, et éventuellement les corrections à apporter.

### 7.1 Vérification des arêtes croisées

Considérons l'exemple de la figure 13. Le support géométrique du contour est représenté par des courbes tiretées. La discrétisation de ce support est représentée en traits fins. On constate que certaines arêtes se croisent, et donc que le contour discrétisé du domaine est mal défini. Pour y remédier, il suffit d'adopter la stratégie ci-dessous.

- Pour chaque domaine  $\Omega_i$  : si deux arêtes se croisent, marquer la plus longue d'entre elles.
- Dans l'espace 3D : subdiviser en deux parties égales chaque arête marquée.
- Pour chaque domaine  $\Omega_i$  : projeter les nouvelles arêtes (traits épais sur la figure).
- Recommencer la vérification tant qu'il existe des arêtes marquées.

En fait, nous présentons ci-après un algorithme plus strict qui donne en outre un meilleur maillage du domaine  $\Omega_i$ .

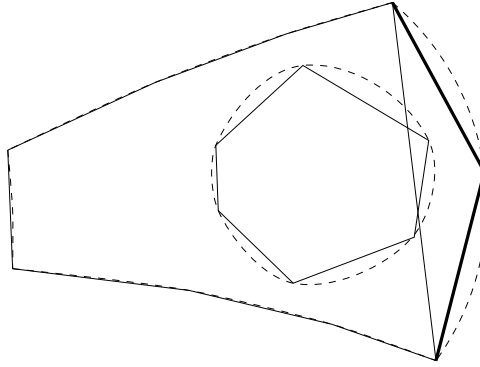


FIG. 13 - Arêtes croisées (traits fins).

## 7.2 Vérification des arêtes proches

La figure 14 montre un contour bidimensionnel dont certaines arêtes sont très proches. Dans ce cas, le maillage du domaine, qui doit respecter la discrétisation du contour, contiendrait nécessairement des triangles très aplatis. Pour y remédier, le principe est d'associer à chaque arête un rectangle (traits tiretés sur la figure) et de considérer les intersections de ce rectangle avec les autres arêtes.

Si  $AB$  est une arête de longueur  $l$ , et  $\alpha$  un coefficient donné (0.5 sur la figure, 0.2 en pratique), alors ce rectangle est construit de la façon suivante. Soient  $\vec{u} = \overrightarrow{AB}$ , et  $\vec{v}$  le vecteur perpendiculaire à  $\vec{u}$  et de norme  $\|\vec{v}\| = \alpha \|\vec{u}\| = \alpha l$ . Les quatre sommets du rectangle sont les points  $A \pm \vec{v}$  et  $B \pm \vec{v}$ . On obtient ainsi un rectangle de dimension  $l \times 2\alpha l$ .

L'algorithme de base est similaire au précédent (voir section 7.1), mais la partie "si deux arêtes se croisent, marquer la plus longue d'entre elles" devient :

Pour chaque arête  $a_i$  :

- Construire le rectangle associé à l'arête  $a_i$ .
- Si un côté du rectangle coupe une autre arête  $a_j$ , marquer l'arête  $a_i$ .

Ainsi, les arêtes trop longues sont subdivisées jusqu'à ce que le rectangle ne coupe aucune arête. Cependant, cet algorithme ne converge pas si deux arêtes forment un angle aigu. Une première modification consiste à ne pas considérer deux arêtes adjacentes, mais ceci n'est pas suffisant. Dans l'exemple de la figure 15, le rectangle associé à l'arête (4,5) coupe l'arête (2,3), alors que les arêtes (4,5) et (2,3) ne sont pas adjacentes. Il faudrait donc subdiviser l'arête (4,5) mais, à cause du nouveau point créé, il faudrait subdiviser l'arête (3,4) à l'itération suivante, et ainsi de suite. Pour y remédier, le rectangle associé à l'arête (4,5) est réduit de manière à ne plus contenir le point 3. L'algorithme précédent est donc précédé par une phase d'initialisation de la taille des rectangles, que nous détaillons ci-dessous.

Pour chaque arête  $AB$  (de longueur  $l$ ) :

- Initialiser  $e = \alpha l$ .
- Pour chaque arête adjacente  $AP$  ou  $BP$ , soit  $H$  la projection orthogonale de  $P$  sur la droite  $(AB)$ . Si le point  $H$  appartient à l'arête  $AB$ , alors calculer  $e = \min(e, \|PH\|)$ .
- Réduire légèrement la valeur de  $e$  (en pratique, multiplier  $e$  par 0.99).
- Associer à l'arête  $AB$  un rectangle de dimension  $l \times 2e$ .



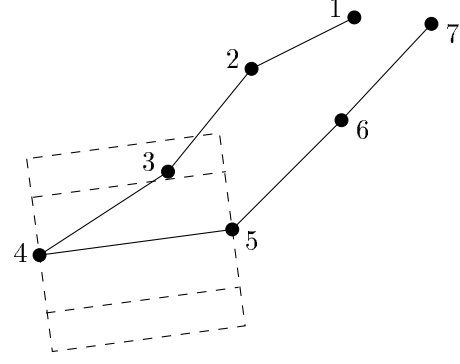
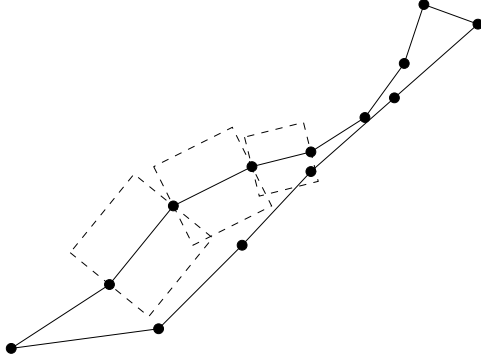


FIG. 14 - *Arêtes proches - Cas général.* FIG. 15 - *Arêtes proches - Cas particulier.*

### 7.3 Vérification des longueurs des arêtes

Dans la discrétisation des contours (initialement ou après application de l'algorithme précédent), les longueurs de deux arêtes adjacentes peuvent être très différentes, ce qui nuit à la qualité du maillage généré. À titre d'exemple, la figure 16 présente une partie de maillage initial (en haut) et après la correction qui a été décrite (au milieu).

Pour corriger les longueurs des arêtes, nous appliquons un algorithme itératif similaire aux précédents, où les arêtes sont "marquées". Supposons que deux arêtes adjacentes soient de longueurs respectives  $l_1$  et  $l_2$ , avec  $l_1 > l_2$ . Si  $l_1 > \alpha l_2$ , où  $\alpha > 1$  est un coefficient fixé a priori (en pratique  $\alpha = 2$  ou  $3$ ), alors l'arête de longueur  $l_1$  est marquée. La figure 16 (en bas) montre le maillage finalement obtenu.

## 8 Maillage des domaines bidimensionnels

Les données du mailleur bidimensionnel sont d'une part le contour discrétisé d'un domaine, et d'autre part une carte de tailles données aux sommets de ce contour. Chaque taille est la moyenne géométrique des longueurs des arêtes issues du sommet. À titre d'exemple, la figure 17 montre quelques maillages obtenus, avec un nombre variable de composantes connexes et de "trous".

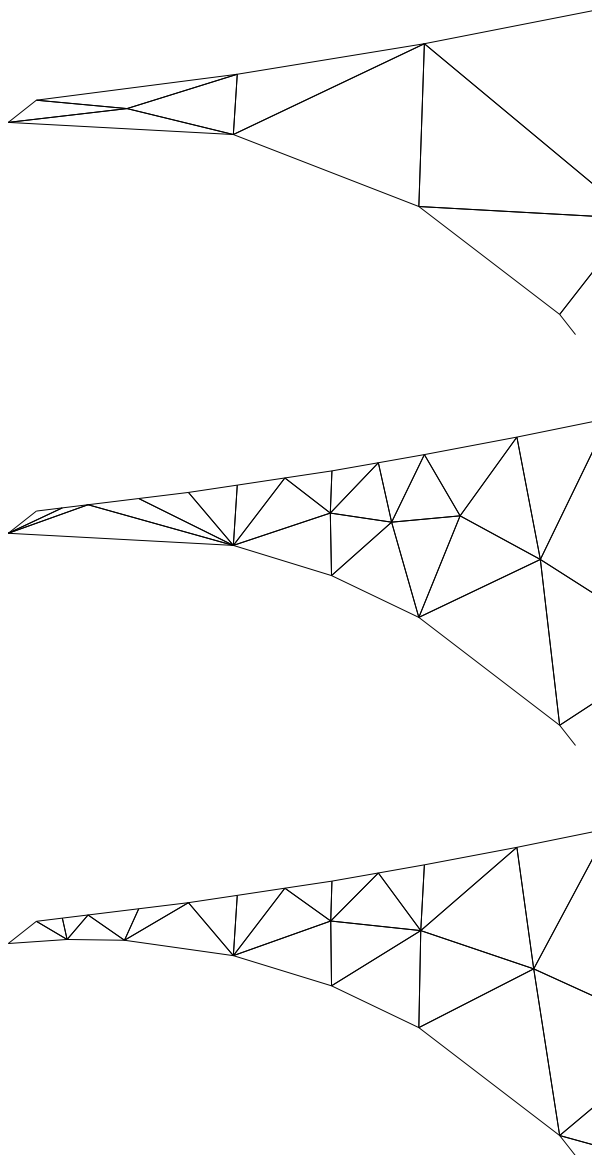


FIG. 16 - *Maillage initial (en haut), après vérification des arêtes proches (au milieu) et après vérification des longueurs (en bas).*

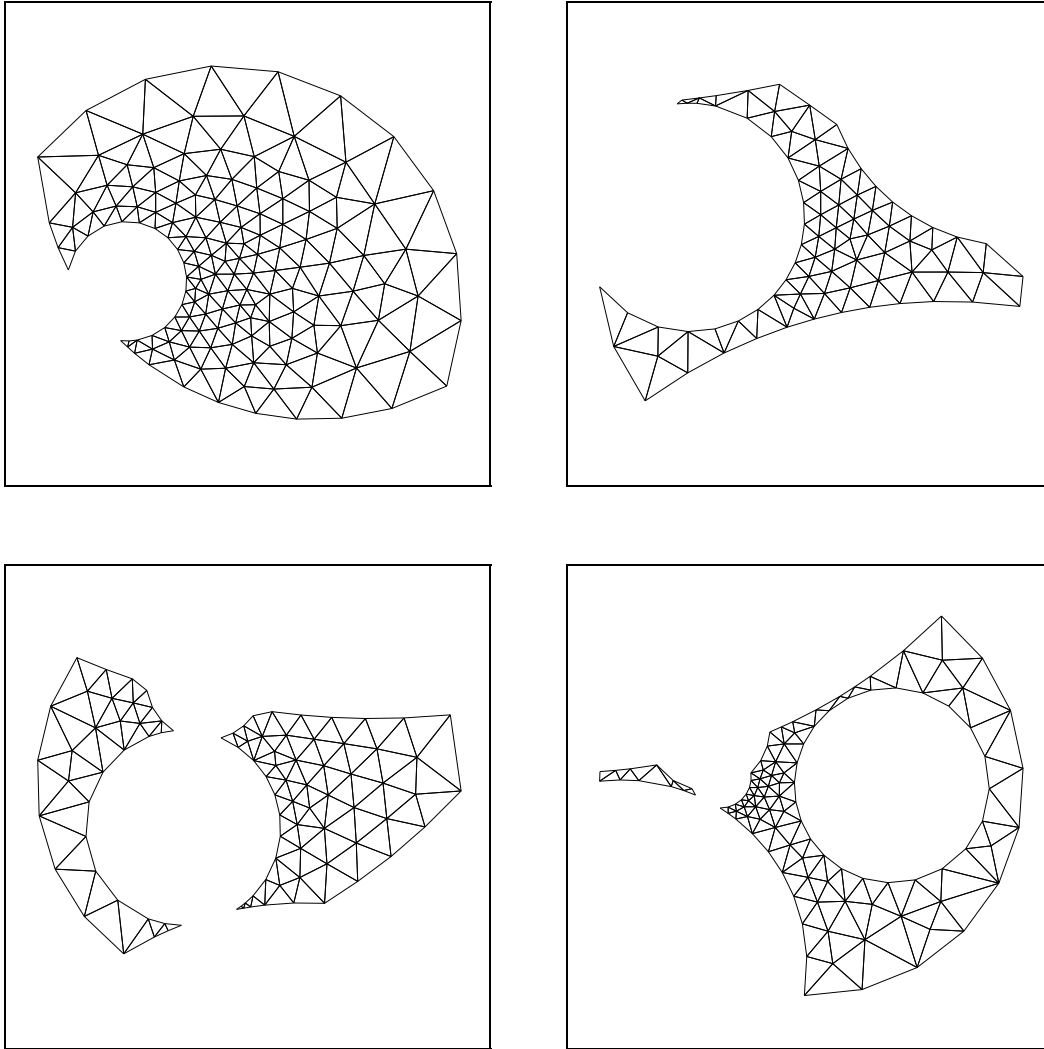


FIG. 17 - *Maillages de quelques domaines.*

## 9 Algorithme complet de la méthode et parallélisation

Cette section récapitule notre méthode, sous la forme de deux algorithmes successifs en pseudo-code :

- **L'algorithme A** lit les données qui définissent les sphères  $\{S_i\}$  et génère une paramétrisation de leur enveloppe, c'est à dire un ensemble  $\{\Omega_i\}$  de domaines de paramètres et un ensemble  $\{\varphi_i\}$  d'applications.
- **L'algorithme B** réalise le maillage d'une surface paramétrée quelconque, définie par des ensembles  $\{\Omega_i\}$  et  $\{\varphi_i\}$ .

L'analyse de ces algorithmes met en évidence de nombreuses parties parallélisables (car elle s'appliquent à des objets indépendants).

### 9.1 Algorithme A

L'algorithme A génère une paramétrisation de l'enveloppe des sphères  $\{S_i\}$  :

- A1. Pour chaque sphère  $S_i$ ,  
lire le centre  $(x_i, y_i, z_i)$  et le rayon  $r_i$ .
- A2. Pour chaque sphère  $S_i$ ,  
Pour chaque sphère  $S_j$ ,  
calculer le cercle intersection de  $S_i$  et  $S_j$ .
- A3. Pour chaque cercle  $C_i$ ,  
Pour chaque cercle  $C_j$ ,  
calculer les points d'intersection de  $C_i$  et  $C_j$ .
- A4. Pour chaque cercle  $C_i$ ,  
fusionner les points d'intersection très proches appartenant à  $C_i$ .
- A5. Pour chaque sphère  $S_i$ ,  
trouver les arcs appartenant à  $S_i$  (cercles et points d'intersection),  
sélectionner les arcs extérieurs,  
trouver un équateur convenable vis à vis de ces arcs.
- A6. Pour chaque sphère  $S_i$ ,  
écrire la définition des domaines  $\{\Omega_i\}$  et des applications  $\{\varphi_i\}$ .

## 9.2 Algorithme B

L'algorithme B réalise le maillage d'une surface paramétrée :

- B1. Pour chaque morceau,
  - lire la paramétrisation de ce morceau, c'est-à-dire :
    - un domaine  $\Omega_i$  (dont le contour est formé de splines),
    - une application  $\varphi_i$  de  $\mathbb{R}^2$  dans  $\mathbb{R}^3$ .
- B2. Pour chaque courbe interface (image d'une frontière de  $\Omega_i$ ),
  - discrétiser cette courbe interface dans  $\mathbb{R}^3$ .
- B3. Pour chaque courbe interface,
  - reporter les discrétisations précédentes de  $\mathbb{R}^3$  dans  $\mathbb{R}^2$ .
- B4. Pour chaque domaine  $\Omega_i$ ,
  - vérifier les arêtes proches dans  $\mathbb{R}^2$ .
- B5. Pour chaque domaine  $\Omega_i$ ,
  - vérifier les longueurs des arêtes dans  $\mathbb{R}^2$ .
- B6. Pour chaque domaine  $\Omega_i$ ,
  - mailler le domaine  $\Omega_i$  dans  $\mathbb{R}^2$ .
- B7. Pour chaque domaine  $\Omega_i$ ,
  - calculer l'image par  $\varphi_i$  du maillage plan de  $\Omega_i$ .

## 9.3 Parallélisation

Pour mailler une enveloppe de sphères, il suffit d'exécuter successivement les algorithmes A et B. Si ces algorithmes sont implémentés directement, les parties les plus coûteuses sont A2, A3 et B6. Nous avons déjà indiqué une optimisation possible de A2 en subdivisant l'espace, et de A3 en évitant de calculer plusieurs fois les mêmes points d'intersection.

Cependant, un gain très important pourrait être atteint en parallélisant certaines tâches. Dans le cas particulier de la tâche B6, chaque domaine peut être maillé indépendamment puisque les frontières sont toutes discrétisées auparavant. Les tâches A2 et A3, ainsi que la plupart des autres tâches, pourraient aussi être accélérées sur une machine parallèle.

## 10 Application à la chimie

Dans le domaine de la chimie, l'étude de la surface des molécules joue un rôle important [1, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13]. En pratique, plusieurs types de surfaces sont définis. La figure 18 montre le schéma bidimensionnel d'une molécule composée de quatre atomes  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $A_3$  et  $A_4$ . Chaque atome a un rayon donné, dit rayon de Van der Waals. L'enveloppe de ces atomes forme la surface de Van der Waals (*SVW*).

Afin d'étudier l'action d'un solvant sur une molécule, ce solvant est simulé par une "sphère d'essai"  $E$  qui roule sur la molécule. Deux autres types de surfaces sont alors considérés :

- La surface accessible au solvant (*SAS*) qui est tracée par le centre de la sphère d'essai. Elle est similaire à la surface de Van der Waals, si l'on augmente le rayon de chaque atome par celui de la sphère d'essai.
- La surface exclue au solvant (*SES*) ou surface moléculaire de Connolly. Elle est tracée par la partie de la sphère d'essai dirigée vers la molécule. Elle est formée à la fois de portions de sphères convexes (lorsque  $E$  est en contact avec un seul atome), de portions de tores concaves (contact avec deux atomes) et de portions de sphères concaves (contact avec trois atomes ou plus).

Compte tenu de notre approche précédente, nous pouvons actuellement mailler les surfaces de type *SVW* ou *SAS*, et non pas *SES*.

La bibliothèque de structures moléculaires MathMol [10] contient la description de la plupart des molécules classiques (eau, glace, carbones, hydrocarbures, acides

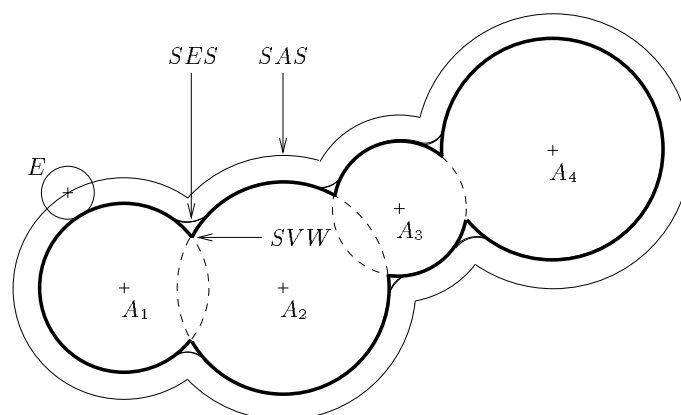


FIG. 18 - Schéma bidimensionnel d'une molécule.

aminés, etc.). Pour une molécule donnée, il est possible d’obtenir un fichier PDB qui contient le centre et le symbole chimique de chaque atome constitutif.

Le rayon d’un atome, connaissant son symbole chimique, est donné par la table 1 ci-dessous. Les atomes sont ordonnés selon la classification périodique des éléments. Chaque case contient le symbole chimique et le rayon de Van der Waals en angström (Å). Signalons que ces valeurs sont fournies à titre indicatif et peuvent être modifiées.

H 1.20							He 1.70
Li 1.82	Be	B	C 1.70	N 1.55	O 1.50	F 1.47	Ne 1.54
Na 2.27	Mg 1.73	Al	Si 2.10	P 1.80	S 1.80	Cl 1.75	A 1.88

TAB. 1 - *Rayon de Van der Waals (Å).*

Lorsqu’une sphère d’essai est utilisée, son rayon est généralement de 1.4 Å (pour simuler une molécule d’eau) ou de valeur inférieure.

Nous présentons ci-après les résultats obtenus successivement dans le cas d’une molécule de pyrène (26 atomes), de glace (93), de carotène (92), de diamant (331) et d’ADN (317). Pour chacune de ces molécules, nous avons généré deux maillages de la surface de Van der Waals (*SVW*) : un maillage “grossier” (l’angle maximal entre le maillage et la surface réelle est de 11°) et un maillage “fin” (angle maximal de 6°). Tous les maillages plans sont générés par le mailleur BL2D [4].

Pour apprécier la qualité des maillages obtenus avec notre méthode, nous indiquons pour chaque exemple les valeurs de six critères. Toutes ces mesures sont normalisées entre 0 (“mauvais”) et 1 (“bon”). Nous rappelons ci-dessous la définition de chaque critère en un sommet quelconque  $P$  du maillage (cf. [6] pour plus de détails).

- **Planarité.** Soit  $\{P_i\}$  l’ensemble des sommets adjacents à  $P$ . Soit  $\nu_P$  la normale unitaire en  $P$  et  $\nu_{P_i}$  la normale unitaire en  $P_i$ . La planarité au sommet  $P$  est liée au plus grand angle entre la normale  $\nu_P$  et les normales  $\{\nu_{P_i}\}$ , et est définie par :

$$\mathcal{P}_P = \frac{1 + \min_i \langle \nu_P, \nu_{P_i} \rangle}{2}.$$

- **Déviatiion.** Une variante du critère précédent est appelée déviation. Soit  $u_{PP_i}$  le vecteur unitaire de direction  $\overrightarrow{PP_i}$ . La déviation au sommet  $P$  est définie comme le plus grand angle entre les arêtes  $\{PP_i\}$  et le plan tangent en  $P$ , et est donnée par :

$$\mathcal{D}_P = 1 - \min_i |\langle \nu_P, u_{PP_i} \rangle|.$$

- **Rugosité.** Soient  $K_1$  et  $K_2$  deux faces adjacentes en une arête  $PQ$ . Soient  $\nu_{K_1}$  et  $\nu_{K_2}$  les normales unitaires aux faces  $K_1$  et  $K_2$ . La rugosité de la surface en l'arête  $PQ$  représente l'angle entre les faces adjacentes à  $PQ$ , et est définie par :

$$\mathcal{R}_{PQ} = \frac{1 + \langle \nu_{K_1}, \nu_{K_2} \rangle}{2}.$$

La rugosité au sommet  $P$  est alors définie par  $\mathcal{R}_P = \min_i \mathcal{R}_{PP_i}$ .

- **Qualité en taille.** Soit  $PQ$  une arête que l'on écrit sous forme paramétrée  $PQ = (P + t \overrightarrow{PQ})_{0 \leq t \leq 1}$ . Il est possible de définir une fonction monotone  $h(t)$  faisant intervenir des propriétés “physiques” (moyenne des tailles des arêtes adjacentes à un sommet) et “géométriques” (rayons de courbure de la surface). La longueur normalisée de  $PQ$  relative à  $h(t)$  est donnée par :

$$l_{PQ} = d(PQ) \int_0^1 \frac{1}{h(t)} dt,$$

où  $d(PQ)$  est la longueur euclidienne usuelle.

La qualité en taille en l'arête  $PQ$  est alors définie par :

$$\mathcal{L}_{PQ} = \begin{cases} l_{PQ} & \text{si } l_{PQ} \leq 1 \\ \frac{1}{l_{PQ}} & \text{si } l_{PQ} > 1 \end{cases},$$

et la qualité en taille au sommet  $P$  par  $\mathcal{L}_P = \min_i \mathcal{L}_{PP_i}$ .

- **Qualité en forme.** Pour un triangle donné  $K$ , la qualité en forme est définie par :

$$\mathcal{Q}_K = \alpha \frac{\rho_K}{h_K} = \alpha \frac{S_K}{p_K h_K},$$



où  $\alpha = \frac{6}{\sqrt{3}}$  est un coefficient de normalisation tel que  $\mathcal{Q}_K = 1$  pour un triangle équilatéral,  $\rho_K$  est le rayon du cercle inscrit,  $h_K$  est la longueur de la plus grande arête,  $S_K$  est la surface,  $p_K$  est le demi-périmètre.

Si  $\{K_i\}$  est l'ensemble des triangles adjacents à  $P$ , la qualité en forme au sommet  $P$  est définie par  $\mathcal{Q}_P = \min_i \mathcal{Q}_{K_i}$ .

- **Critère combiné.** En un sommet  $P$  donné, les cinq critères précédents peuvent être combinés par leur moyenne géométrique :

$$\mathcal{C}_P = \sqrt[5]{\mathcal{P}_P \mathcal{D}_P \mathcal{R}_P \mathcal{L}_P \mathcal{Q}_P}.$$

Pour un maillage donné contenant les sommets  $\{P_i\}$ ,  $i = 1, \dots, n$ , et pour un critère donné ( $\mathcal{P}$ ,  $\mathcal{D}$ ,  $\mathcal{R}$ ,  $\mathcal{L}$  ou  $\mathcal{Q}$ ), nous venons de définir la valeur  $V_i$  de ce critère en chaque sommet  $P_i$ . Dans les sections suivantes, nous donnons le minimum et la moyenne de ces valeurs sur l'ensemble de tous les sommets du maillage, c'est-à-dire

$$\min_{i=1, \dots, n} V_i \quad \text{et} \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n V_i.$$

Les trois premiers critères ( $\mathcal{P}$ ,  $\mathcal{D}$ ,  $\mathcal{R}$ ) servent à évaluer l'approximation géométrique de la surface. Les deux suivants ( $\mathcal{L}$ ,  $\mathcal{Q}$ ) indiquent que les triangles sont plus ou moins équilatéraux, propriété généralement fondamentale pour les calculs par éléments finis. Le dernier critère ( $\mathcal{C}$ ) donne une appréciation générale.

Pour chaque exemple, un histogramme de qualité des triangles est présenté. Il indique le nombre de triangles dont la qualité (en forme) appartient à un intervalle donné. Enfin, deux figures représentent le maillage avec ou sans les équateurs (*go* = maillage grossier ombré, *gb* = maillage grossier blanc, *fo* = maillage fin ombré, *fb* = maillage fin blanc).

### 10.1 Pyrène - Maillage grossier

La molécule de pyrène comprend 26 atomes, d'où 52 domaines de paramètres. Le maillage "grossier" (angle maximal de  $11^\circ$ ) contient 1153 sommets et 2302 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 55 corrections, et celle des longueurs des arêtes à 11 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.0309 et 0.898. Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 2.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.884	0.967
Déviaton	0.650	0.825
Rugosité	0.944	0.982
Qualité en taille	0.611	0.922
Qualité en forme	0.338	0.835
Critère combiné	0.646	0.904

TAB. 2 - *Critères de qualité.*

L'histogramme de la figure 19 indique que 99.3% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

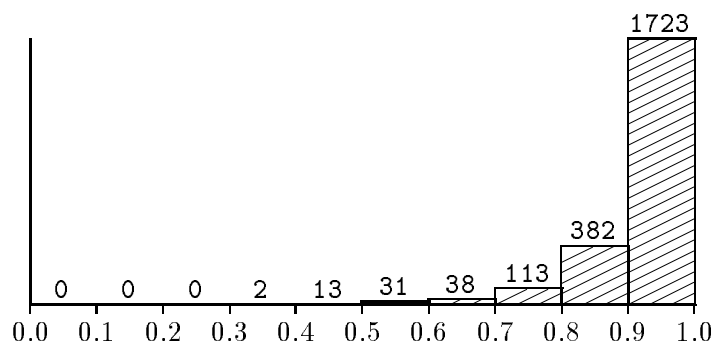
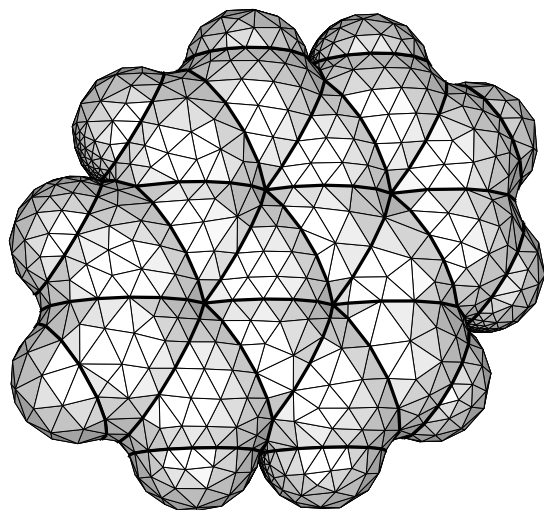
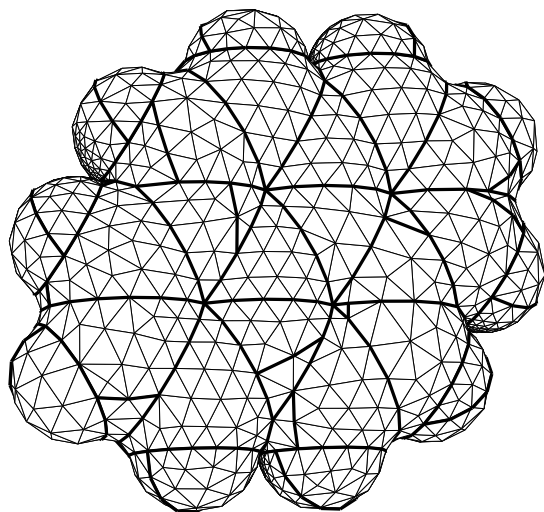


FIG. 19 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis" (voir figures 20 et 21).

FIG. 20 - *Pyrène (go)*.FIG. 21 - *Pyrène (gb)*.

## 10.2 Pyrène - Maillage fin

La molécule de pyrène comprend 26 atomes, d'où 52 domaines de paramètres. Le maillage "fin" (angle maximal de  $6^\circ$ ) contient 3347 sommets et 6690 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 28 corrections, et celle des longueurs des arêtes à 6 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.0312 et 0.433. Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 3.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.967	0.989
Déviaton	0.817	0.895
Rugosité	0.984	0.994
Qualité en taille	0.490	0.908
Qualité en forme	0.336	0.902
Critère combiné	0.663	0.936

TAB. 3 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 22 indique que 99.8% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

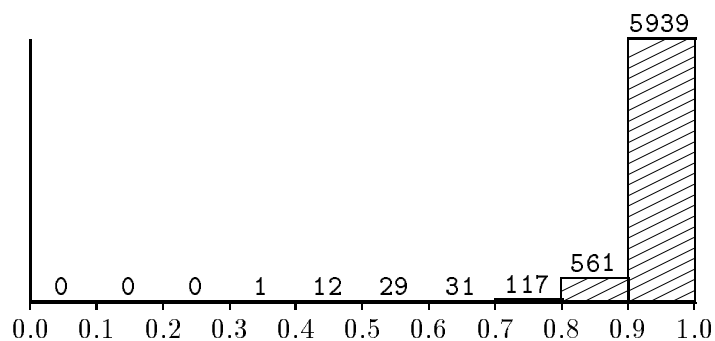
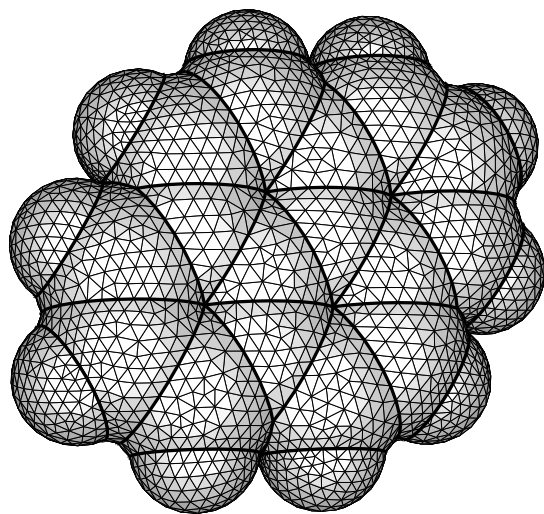
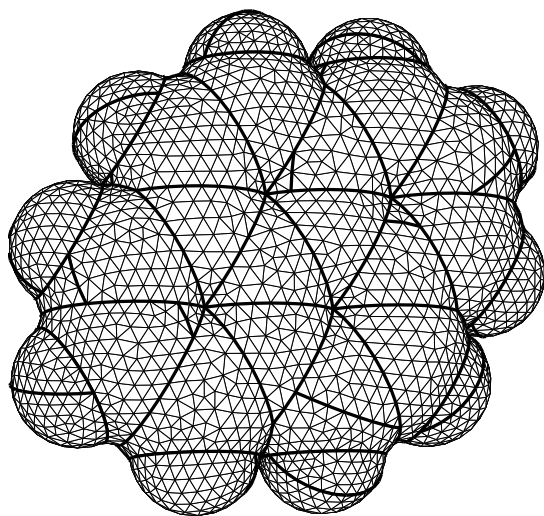


FIG. 22 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis" (voir figures 23 et 24).

FIG. 23 - *Pyrène (fo)*.FIG. 24 - *Pyrène (fb)*.

### 10.3 Glace - Maillage grossier

La molécule de glace comprend 93 atomes, d'où 186 domaines de paramètres. Le maillage "grossier" (angle maximal de  $11^\circ$ ) contient 4442 sommets et 8924 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 1 correction, et celle des longueurs des longueurs des arêtes à 7 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.0804 et 0.772. Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 4.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.894	0.962
Déviaton	0.665	0.798
Rugosité	0.937	0.979
Qualité en taille	0.596	0.927
Qualité en forme	0.415	0.871
Critère combiné	0.673	0.905

TAB. 4 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 25 indique que 99.9% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

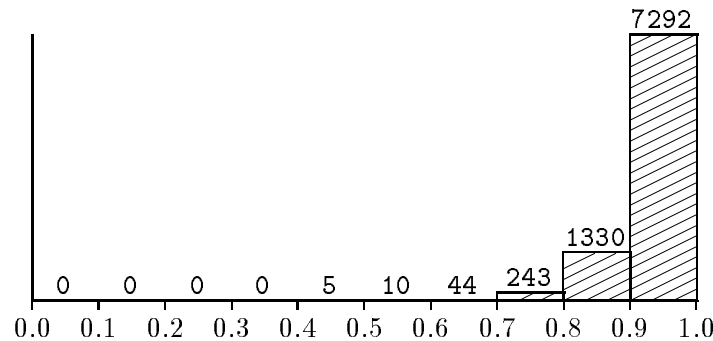
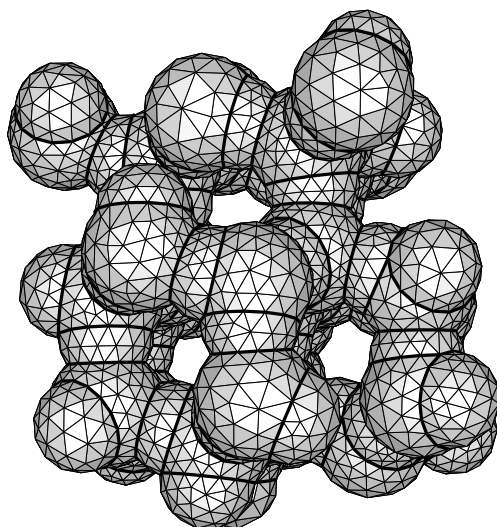
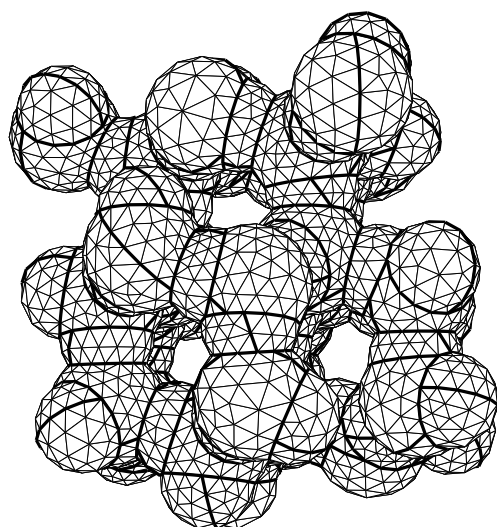


FIG. 25 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis" (voir figures 26 et 27).

FIG. 26 - *Glace (go)*.FIG. 27 - *Glace (gb)*.

## 10.4 Glace - Maillage fin

La molécule de glace comprend 93 atomes, d'où 186 domaines de paramètres. Le maillage "fin" (angle maximal de  $6^\circ$ ) contient 16753 sommets et 33546 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 0 correction, et celle des longueurs des longueurs des arêtes à 4 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.111 et 0.398. Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 5.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.964	0.989
Déviation	0.807	0.898
Rugosité	0.984	0.994
Qualité en taille	0.474	0.920
Qualité en forme	0.238	0.906
Critère combiné	0.613	0.941

TAB. 5 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 28 indique que 99.9% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

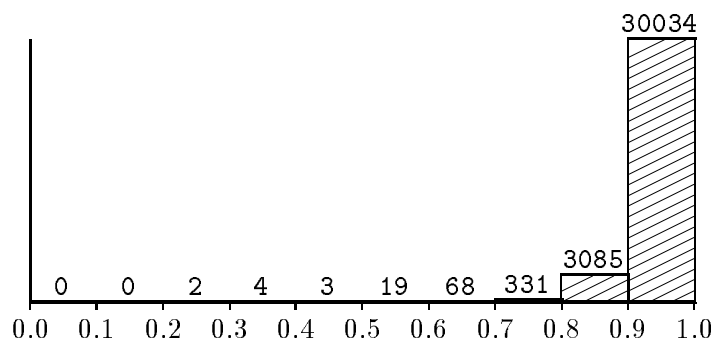
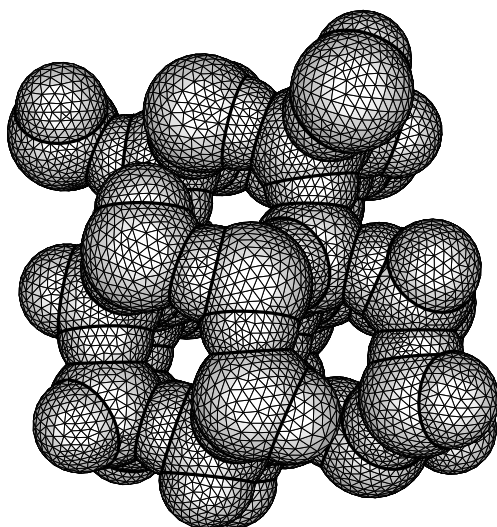
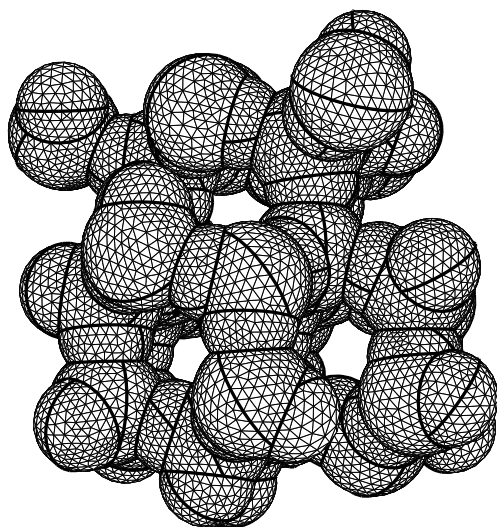


FIG. 28 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis" (voir figures 29 et 30).



FIG. 29 - *Glacé (fo)*.FIG. 30 - *Glacé (fb)*.

### 10.5 Carotène - Maillage grossier

La molécule de carotène comprend 92 atomes, d'où 184 domaines de paramètres. Le maillage "grossier" (angle maximal de  $11^\circ$ ) contient 5873 sommets et 11742 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 188 corrections, et celle des longueurs des arêtes à 318 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.00941 et 0.882 (une arête est très petite car elle appartient à un triangle dont les deux autres côtés sont des arêtes frontières formant un angle très aigu). Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 6.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.876	0.975
Dévation	0.638	0.857
Rugosité	0.934	0.987
Qualité en taille	0.553	0.935
Qualité en forme	0.154	0.825
Critère combiné	0.537	0.914

TAB. 6 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 31 indique que 99.4% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

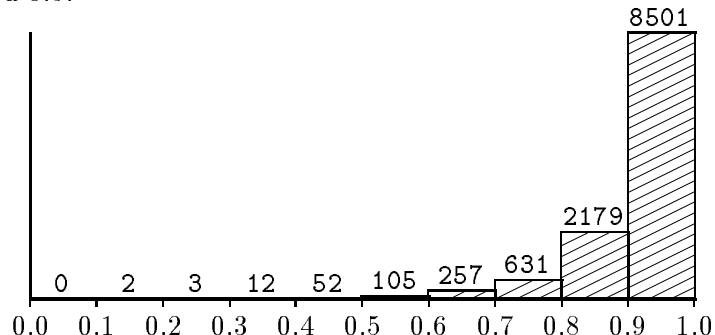
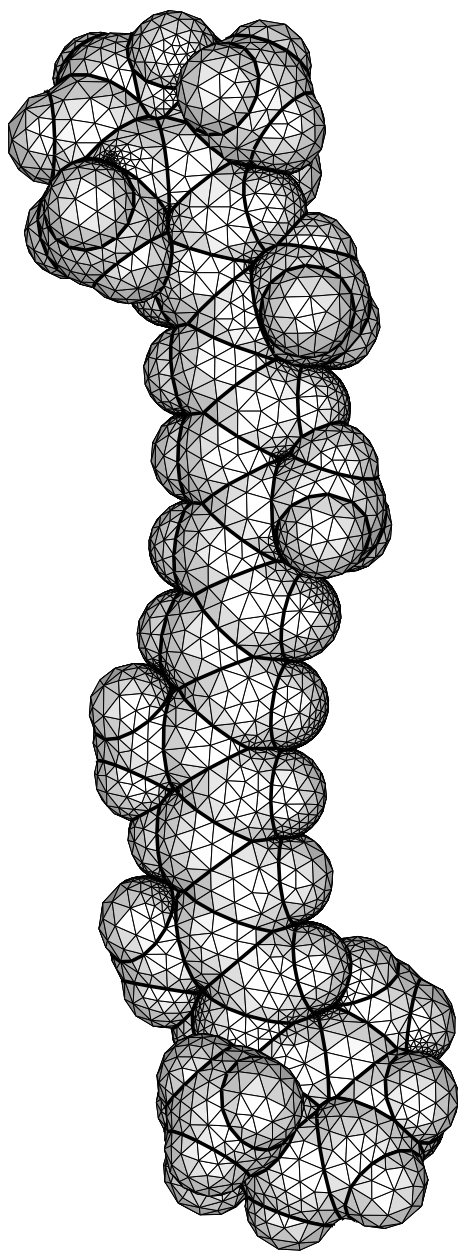
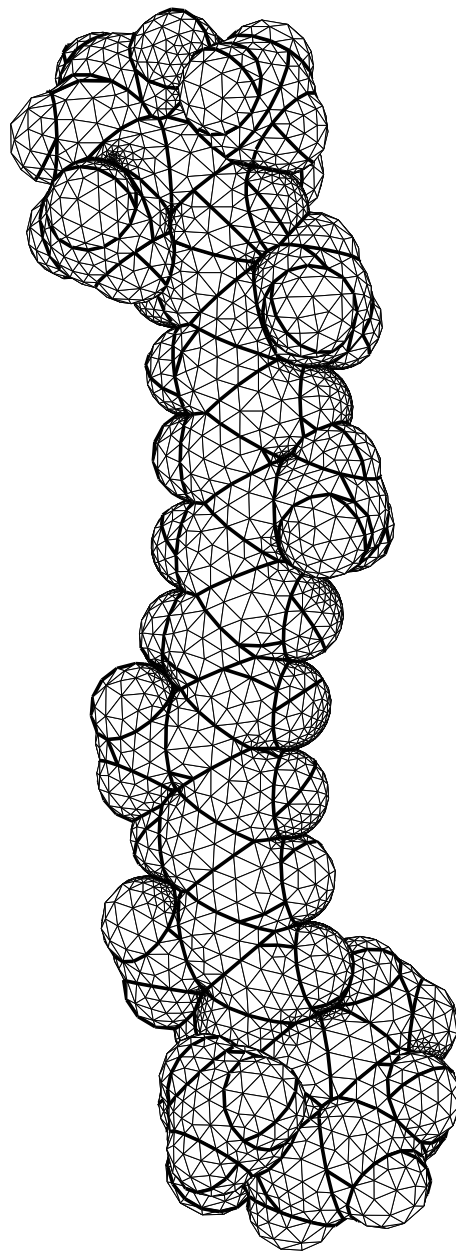


FIG. 31 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis", malgré 5 triangles de qualité inférieure à 0.3 dus à des arêtes bloquées (voir figures 32 et 33).

FIG. 32 - *Carotène (go)*.FIG. 33 - *Carotène (gb)*.

## 10.6 Carotène - Maillage fin

La molécule de carotène comprend 92 atomes, d'où 184 domaines de paramètres. Le maillage "fin" (angle maximal de  $6^\circ$ ) contient 16661 sommets et 33318 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 111 corrections, et celle des longueurs des longueurs des arêtes à 165 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.00941 et 0.442 (une arête est très petite car elle appartient à un triangle dont les deux autres côtés sont des arêtes frontières formant un angle très aigu). Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 7.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.966	0.991
Dévation	0.814	0.913
Rugosité	0.981	0.996
Qualité en taille	0.397	0.927
Qualité en forme	0.289	0.895
Critère combiné	0.616	0.943

TAB. 7 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 34 indique que 99.9% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

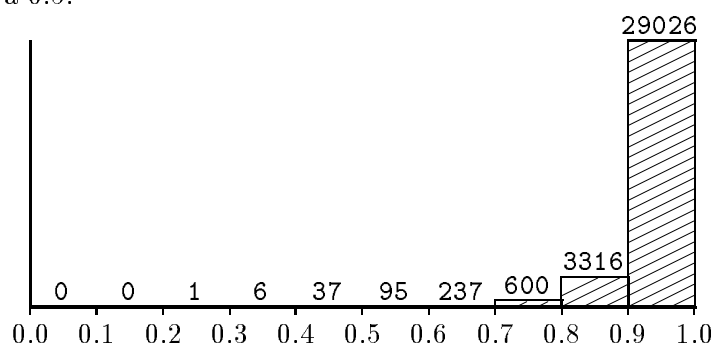
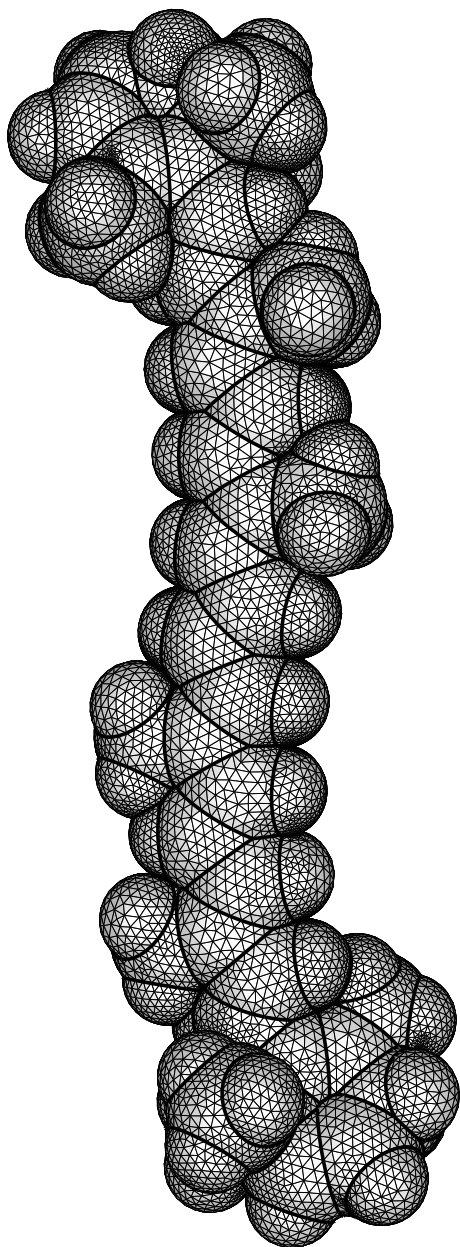
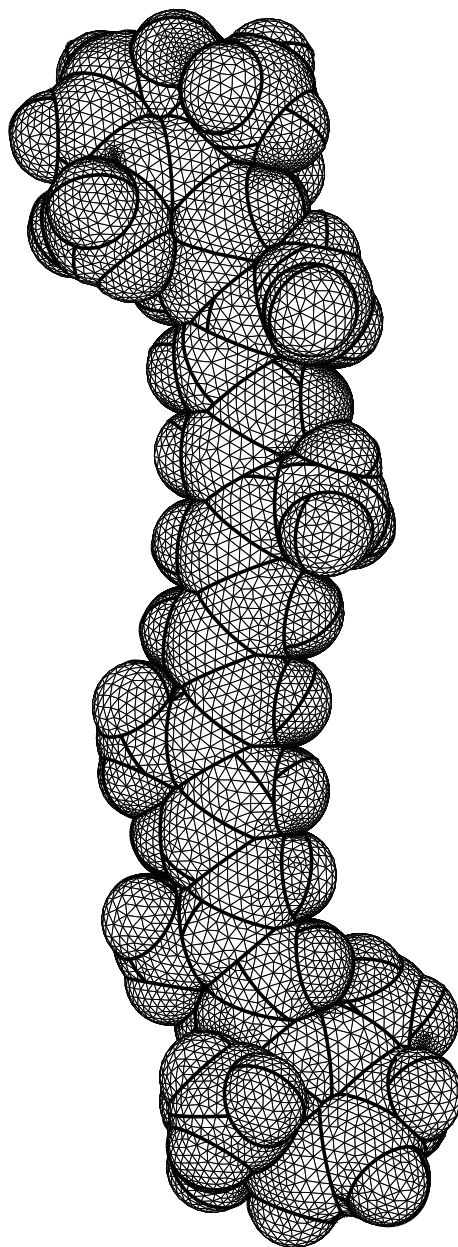


FIG. 34 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis", malgré 1 triangle de qualité inférieure à 0.3 dû à des arêtes bloquées (voir figures 35 et 36).

FIG. 35 - *Carotène (fo)*.FIG. 36 - *Carotène (fb)*.

## 10.7 Diamant - Maillage grossier

La molécule de diamant comprend 331 atomes, d'où 307 domaines de paramètres (certains domaines sont entièrement à l'intérieur d'un autre atome). Le maillage "grossier" (angle maximal de  $11^\circ$ ) contient 5372 sommets et 10740 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 0 correction, et celle des longueurs des longueurs des arêtes à 11 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.138 et 0.913. Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 8.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.685	0.967
Dévation	0.177	0.825
Rugosité	0.282	0.977
Qualité en taille	0.388	0.938
Qualité en forme	0.362	0.881
Critère combiné	0.344	0.916

TAB. 8 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 37 indique que 99.9% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

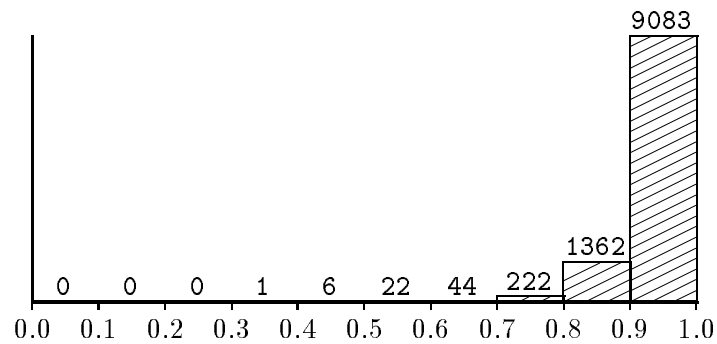


FIG. 37 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis" (voir figures 38 et 39).

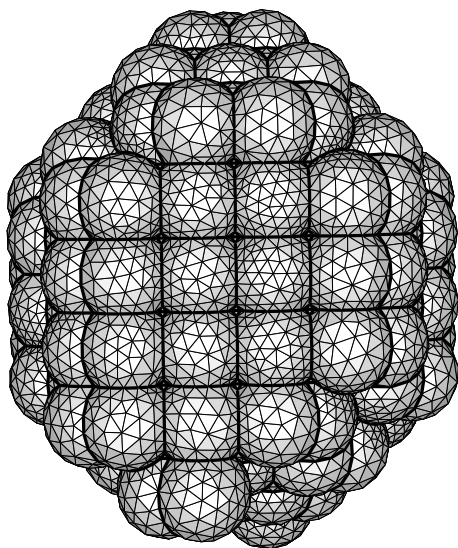


FIG. 38 - *Diamant (go)*.

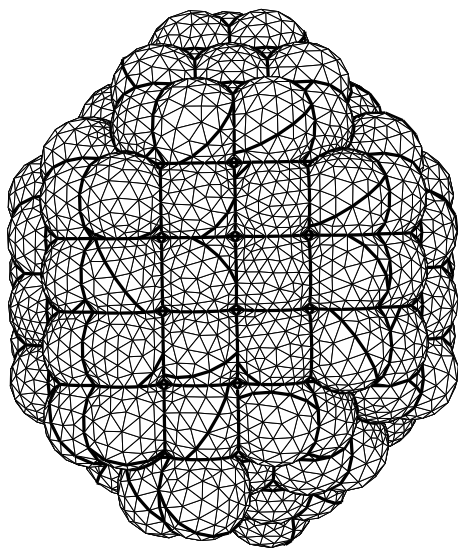


FIG. 39 - *Diamant (gb)*.

## 10.8 Diamant - Maillage fin

La molécule de diamant comprend 331 atomes, d'où 332 domaines de paramètres (certains domaines sont entièrement à l'intérieur d'un autre atome). Le maillage "fin" (angle maximal de  $6^\circ$ ) contient 19908 sommets et 39812 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 0 correction, et celle des longueurs des longueurs des arêtes à 6 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.107 et 0.422. Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 9.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.671	0.990
Déviaton	0.103	0.911
Rugosité	0.261	0.993
Qualité en taille	0.256	0.944
Qualité en forme	0.213	0.918
Critère combiné	0.251	0.950

TAB. 9 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 40 indique que 99.9% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

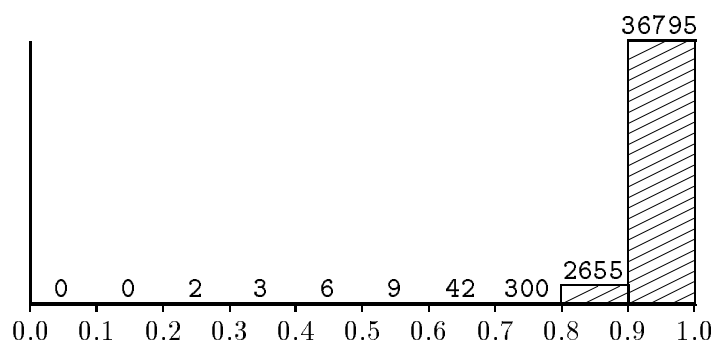
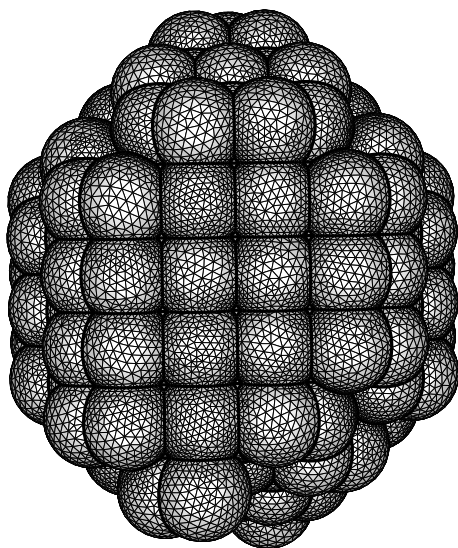
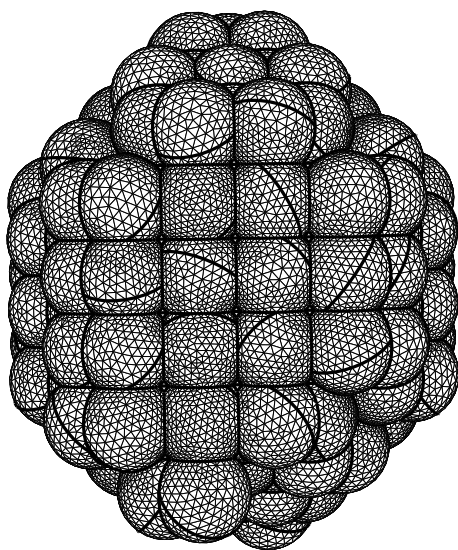


FIG. 40 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis" (voir figures 41 et 42).



FIG. 41 - *Diamant (fo)*.FIG. 42 - *Diamant (fb)*.

## 10.9 ADN - Maillage grossier

La molécule d'ADN comprend 317 atomes, d'où 634 domaines de paramètres. Le maillage "grossier" (angle maximal de  $11^\circ$ ) contient 20364 sommets et 40890 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 609 corrections, et celle des longueurs des arêtes à 769 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.00812 et 0.861 (une arête est très petite car elle appartient à un triangle dont les deux autres côtés sont des arêtes frontières formant un angle très aigu). Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 10.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.911	0.976
Déviaton	0.625	0.861
Rugosité	0.938	0.987
Qualité en taille	0.572	0.936
Qualité en forme	0.150	0.816
Critère combiné	0.224	0.913

TAB. 10 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 43 indique que 99.3% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

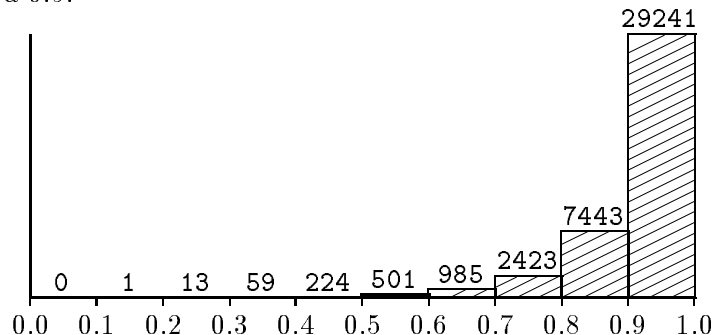


FIG. 43 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis", malgré 14 triangles de qualité inférieure à 0.3 dus à des arêtes bloquées (voir figures 44 et 45).

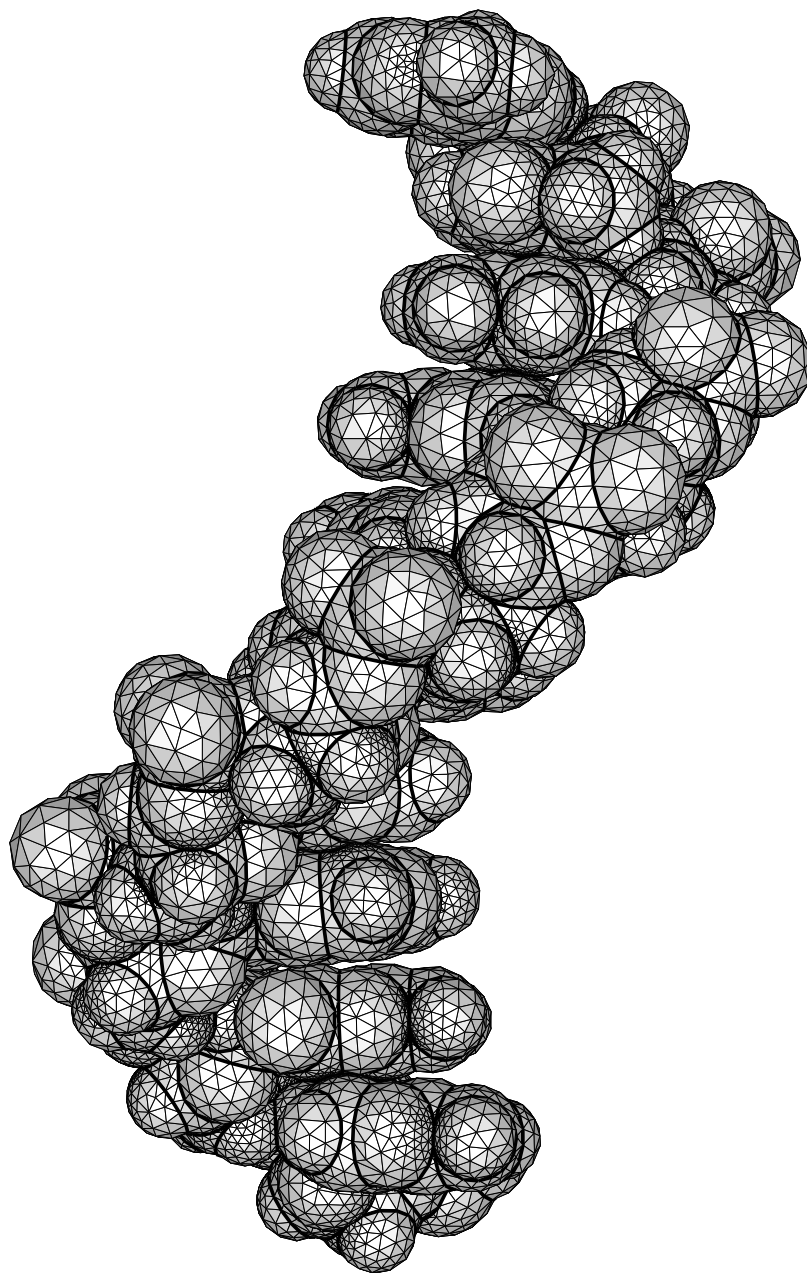


FIG. 44 -  $ADN (go)$ .

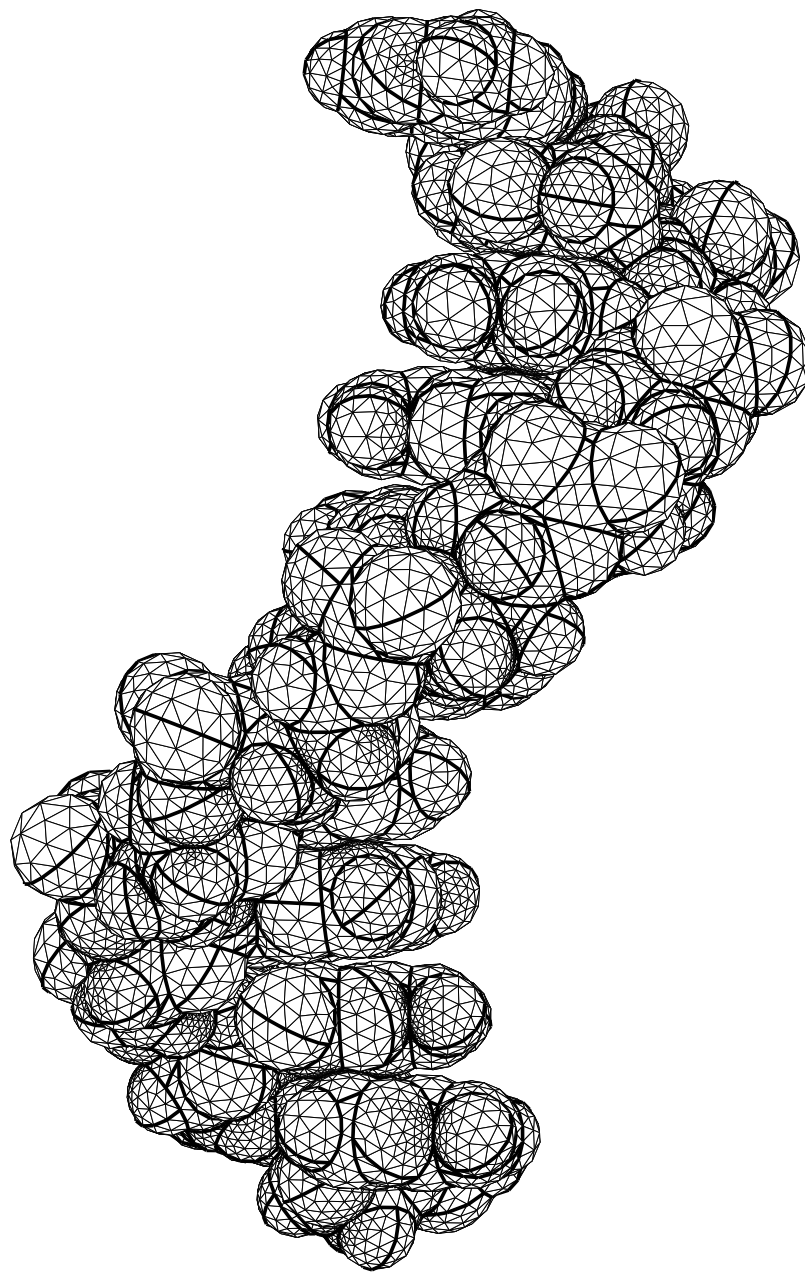


FIG. 45 -  $ADN(gb)$ .

### 10.10 ADN - Maillage fin

La molécule d'ADN comprend 317 atomes, d'où 634 domaines de paramètres. Le maillage "fin" (angle maximal de  $6^\circ$ ) contient 60991 sommets et 122144 triangles. La vérification des arêtes proches donne lieu à 317 corrections, et celle des longueurs des longueurs des arêtes à 390 corrections. Les longueurs euclidiennes des arêtes sont comprises entre 0.00879 et 0.488 (une arête est très petite car elle appartient à un triangle dont les deux autres côtés sont des arêtes frontières formant un angle très aigu). Les valeurs des six critères de qualité sont résumées dans le tableau 11.

	Minimum	Moyenne
Planarité	0.923	0.992
Déviation	0.770	0.919
Rugosité	0.894	0.996
Qualité en taille	0.420	0.935
Qualité en forme	0.062	0.889
Critère combiné	0.212	0.945

TAB. 11 - *Critères de qualité*

L'histogramme de la figure 46 indique que 99.8% des triangles ont une qualité supérieure à 0.5.

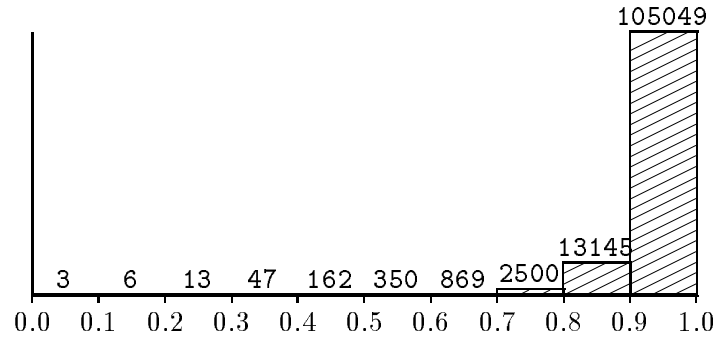


FIG. 46 - *Histogramme de qualité des triangles.*

Tous ces résultats montrent que le maillage respecte correctement les critères "géométriques" et "éléments finis", malgré 22 triangles de qualité inférieure à 0.3 dus à des arêtes bloquées (voir figures 47 et 48).

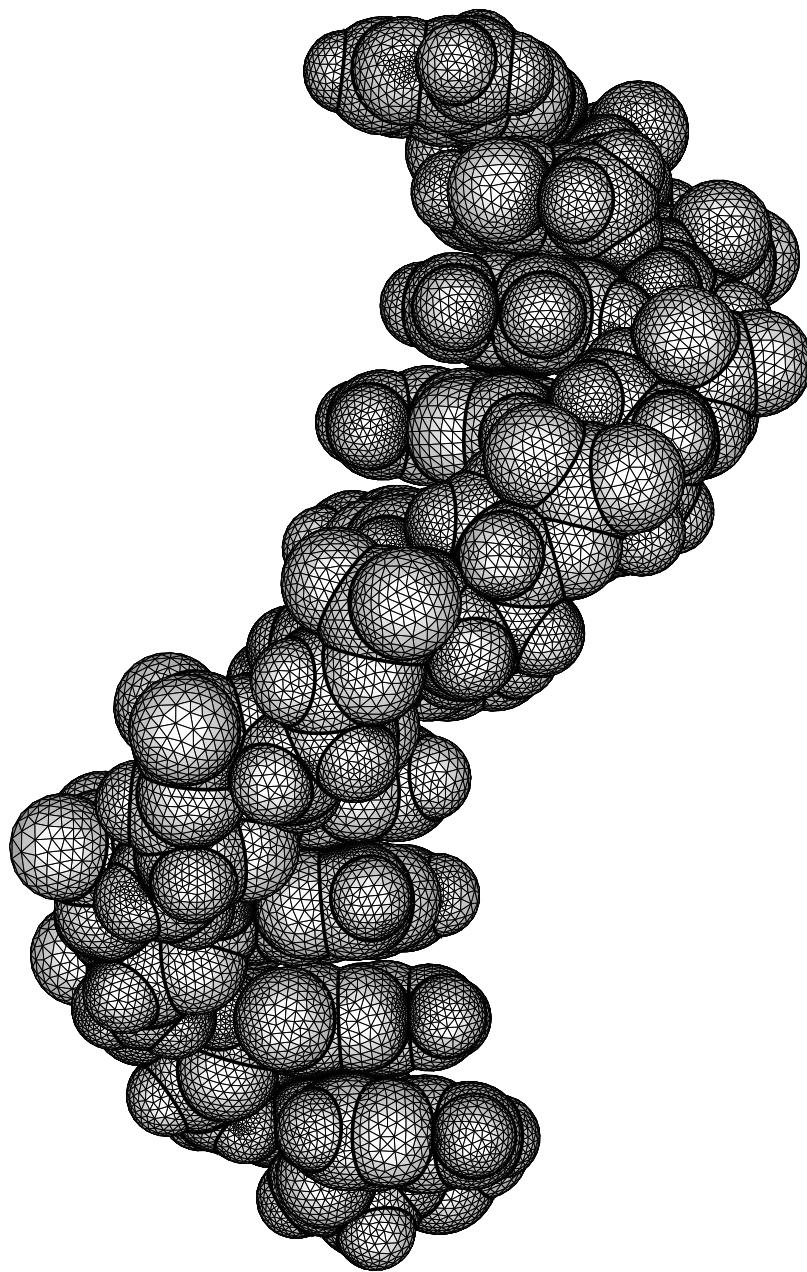
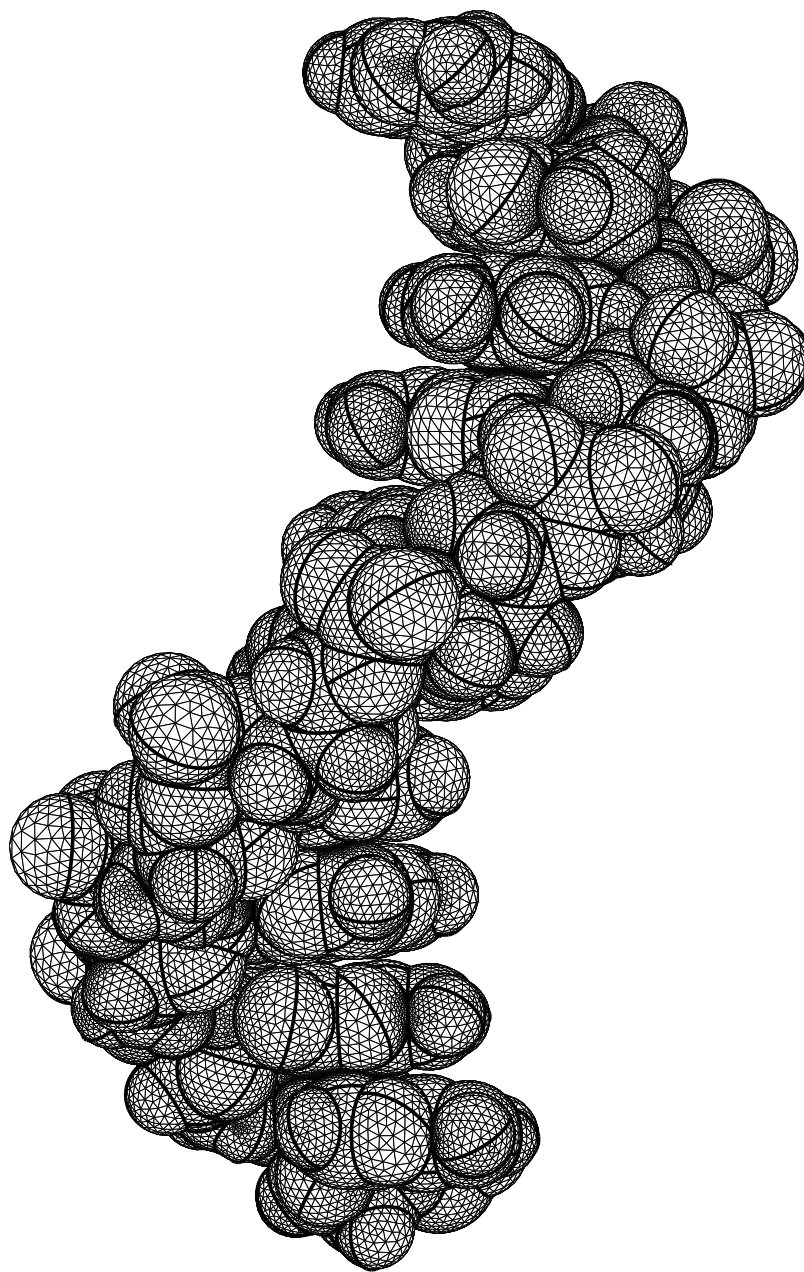


FIG. 47 -  $ADN(f_0)$ .

FIG. 48 -  $ADN(fb)$ .

## 11 Conclusion

Nous avons présenté une méthode permettant de mailler l'enveloppe d'une réunion de sphères a priori quelconques. Cette méthode comprend deux étapes principales :

- exhiber une définition de l'enveloppe sous une forme paramétrée,
- utiliser un mailleur capable de traiter les surfaces paramétrées en général.

Par une analyse des algorithmes correspondant à ces deux étapes, nous avons montré que de nombreuses tâches pouvaient être optimisées et/ou parallélisées.

En appliquant notre méthode au domaine de la chimie, nous avons généré des maillages qui respectaient tous correctement des critères “géométriques” et “éléments finis”. Les surfaces considérées étaient de type *SVW* (surface de Van der Waals). La même approche serait applicable aux surfaces de type *SAS* (surface accessible au solvant). Une recherche future consisterait à étendre ces résultats au cas des surfaces de type *SES* (surface exclue au solvant, ou surface moléculaire de Connolly).

## Références

- [1] N. AKKIRAJU, H. EDELSBRUNNER, *Triangulating the surface of a molecule*, Discrete Applied Mathematics 71, pp. 5-22, 1996.
- [2] M. BERGER, *Géométrie – tome 2*, Nathan, 1990.
- [3] H. BOROUCAKI, P. LAUG, *Maillage de surfaces paramétriques. Partie IV : surfaces composées*, Rapport de Recherche INRIA à paraître.
- [4] H. BOROUCAKI, P. LAUG, *Le mailleur adaptatif bidimensionnel BL2D : manuel d'utilisation et documentation*, Rapport Technique INRIA RT-0185, décembre 1995.
- [5] M.L. CONNOLLY, *Molecular Surfaces: A Review*, <http://www.awod.com/netsci/Science/Compchem/feature14.html>
- [6] P. FREY, H. BOROUCAKI, *Surface Mesh Evaluation*, 6th International Meshing Roundtable, Park City, Utah, October 13-15, 1997.



- [7] M.F. SANNER, A.J. OLSON, J.C. SPEHNER, *Reduced Surface: An Efficient Way to Compute Molecular Surfaces*, Biopolymers, vol. 38, 305-320, 1996.
- [8] S. WARDE, *Molecular modelling reveals surface properties*, Scientific Computing World, July 1996.
- [9] GRIP Project,  
<http://www.cs.unc.edu/Research/graphics/GRIP/>
- [10] MathMol,  
<http://www.nyu.edu/pages/mathmol/>
- [11] Molecular Surface Computation Home Page (Michel F. Sanner),  
[http://www.scripps.edu/pub/olson-web/people/sanner/html/msms\\_home.html](http://www.scripps.edu/pub/olson-web/people/sanner/html/msms_home.html)
- [12] RasMol Home Page,  
<http://klaatu.oit.umass.edu:80/microbio/rasmol/>
- [13] Simplification Envelopes,  
<http://www.cs.unc.edu/geom/envelope.html>



---

Unité de recherche INRIA Lorraine, Technopôle de Nancy-Brabois, Campus scientifique,  
615 rue du Jardin Botanique, BP 101, 54600 VILLERS LÈS NANCY  
Unité de recherche INRIA Rennes, Irisa, Campus universitaire de Beaulieu, 35042 RENNES Cedex  
Unité de recherche INRIA Rhône-Alpes, 655, avenue de l'Europe, 38330 MONTBONNOT ST MARTIN  
Unité de recherche INRIA Rocquencourt, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex  
Unité de recherche INRIA Sophia-Antipolis, 2004 route des Lucioles, BP 93, 06902 SOPHIA-ANTIPOLIS Cedex

---

Éditeur  
INRIA, Domaine de Voluceau, Rocquencourt, BP 105, 78153 LE CHESNAY Cedex (France)  
ISSN 0249-6399